《高等量子力学》

李新征

北京大学物理学院

前言

基于教学经历对课堂讲义进行整理，进而出版一本可以在一定程度上帮助像“曾经的那个迷茫的自己”一样的迷茫的物理学专业的中国学生理解这门课程的读物[1]，这貌似是笔者科研生涯中的一个极其重要的调味品与推进剂。对笔者而言，自入职北京大学，这个习惯一直保持。坚持这个习惯，笔者有两个原因。第一，要想写出东西的话，自己必须不停的学习。因此，“持续输出”可以逼着自己坚持学习。毫不夸张地讲，对于一个大学教师，这个习惯是他/她在课堂上表现出自信进而感染学生的基础。没有这个习惯，高水平的大学课堂是无从谈起的。第二，这个习惯所带来的效果是除了对课堂教学有帮助，也能给自己的科研提供一些新思考与新问题[2]。如果身体条件允许，笔者这个习惯会一直继续。

2026 年 1 月 1 日，在经历了一个学期的让人筋疲力尽的《高等量子力学》教学实践后[3]，当笔者开始准备这门课程的期末考题的时候，虽然对课程内容依然心里没底，但笔者还是不自觉地在个人电脑的“书籍出版”目录下建立了一个名为“高等量子力学”的新文件夹并敲下上面这段文字。

---

[1]这里，笔者强调讲义自己整理的是课堂讲义，出版的是某种“读物”而非教材（虽然有些时候我的书也会被一些同行当作教材）。主要考虑，是“读物”更自由一些，不用顾忌太多。后面，笔者会强调*去除这些顾忌后笔者才得以开始本书写作*的这个亲身经历。有了这些顾忌，对于作者而言，写作是痛苦的。只有在去除这些顾忌后，至少对笔者而言，写作才得以顺畅。

[2]教研不分家。好的讲义一定要体现作者基于科研对学科的理解。好的科研也一定是来自课本。如果是基础研究而非应用研究，目的也是要进入课本。当然，能不能进入课本要另说，但是不是瞄着要进入课本，对大学老师的教学与科研来讲，是一个态度问题。

[3]毫不夸张地讲，2025 年秋季学期的任何每两次课之间就像在进行一个四百米的冲刺。从开始到结束，没有可以松弛的时间点。一个学期讲下来，教学效果虽然很令人失望，但至少完成了。同时，对笔者而言，体力确实已经到达了极限。

这个动作，对笔者而言意味着的是下一个漫长的写作周期的开始[4]。这个周期会持续多久？笔者并不清楚。但笔者清楚的是自己在 2026 年初这个时间节点，一定要开始这个周期。不然的话，2026 秋季学期的教学依然会手忙脚乱。

考虑到市面上出版的《高等量子力学》的教材已经很多了，笔者对自己的课堂讲义的准备无法做到全面，一个比较明智的选择，就是围绕一些笔者认为一定要强调的特点来展开写作，让喜欢笔者这种比较唠叨、不停重复、强调心得的读者能够受益[5]。而这些特点，一定要与笔者的知识结构相关（换句话说就是自己的学习、教学与研究经历相关），也与时代挂钩！基于这个考虑，笔者认为自己这本《高等量子力学》讲义需要围绕下面四个特点展开。

第一点就是“与时代挂钩”。在 2026 年这个时间节点，这一点很重要！人工智能是我们这个时代的一个我们无法绕过的主题。笔者虽然不做这个方向，但是对这个方向取得的进展算是了解的比较早且极其认可的[6]。人工智能在学习上给

---

[4]上一个写作周期的持续时间是 2021 年 7 月至 2025 年 3 月底，写的书的名字叫做《物理学是什么？从自然哲学到现代物理学》。它是笔者对自己承担的一门叫做《今日物理》的本科生通识课的教学的总结。在 2026 年 1 月这个时间节点，应该说上一个写作周期刚刚结束不是太久，笔者本来打算休息几年再考虑下一步。但因为在《高等量子力学》（英文版）的教学中的感想很多，收获也有一些，在学期结束的时候，还是迫不及待地开始了这个新周期。

[5]笔者不太谦虚地把这个定义为自己的写作风格，不认同的朋友掠过即可。

[6]笔者的博士导师 Matthias Scheffler 教授是这个领域的一个比较重要的推动者。早在上个世纪末，他就开展了这个方面的研究（他的第一篇这个方向的文章是 2004 年【Lorenz，2004】）。北京大学物理学院最早开展这个方面研究的是我们凝聚态所的陈基老师，笔者也是他博士论文的一个指导老师（与王恩哥老师共同指导）。笔者回国后，Matthias Scheffler 教授曾经建议笔者多开展这个方面的研究，笔者仅仅是因为比较喜欢古朴的理论（特别是像量子多体、路径积分这样的理论）并且不愿意做“太多人做”的方向，没有采纳这个建议。这个是个人喜好，从工作的价值判断上来讲，笔者是深度认可人工智能这个方向的！2024 年秋天，当诺贝尔物理奖公布的时候，笔者和北京大学物理学院理论所的李定平老师聊到这个事情的时候还一起吐槽过那些哀嚎的同行（面对复杂系统，这是一个绕不过的工具）。现在，人工智能会改变我们的学习与工作习惯应该会成为一个不争的事实，很多当年极度反对这个方向的同事甚至也开始全身投入。因此，不管从哪点来讲，笔者在写作中强调这一点都是与笔者一直以来的经历与态度一致的。这个态度也决定

我们带来的一个直接效果是它会把我们从一些繁琐的推导中解脱出来。与之相应，一个科研工作者脑子里*物理图像是否清楚、物理问题定位是否准确*，就变得比*掌握解题技巧、具备推导能力*更加重要了[7]。基于这个考虑，我们的讲义将更加注重物理图像的表达，偏重跟学生交流如何去建立知识体系以及如何去定位我们关心的物理问题？一些传统的可以通过考试“来考的”内容，笔者不会在意[8]。

这样做的好处，是在我们完成学习面临实际问题的解决的时候，因为是开放环境（不是在考场上，有很多工具是可以用的），心里不会慌。但缺点，就是它太“反我们已经习惯的学习习惯了”。学生在面对考试的时候（往往是闭卷），心里会没底。但我们需要知道的是我们进行物理学的学习并不是为了考试，而是为了学会在开放的环境中从事创新性的科研工作。因此，在这里，笔者希望把“尊重时代特征，强调开放环境中的实际效果”作为本书的第一个特点来展开写作。

第二，是这个讲义的内容应该会包含比较多的“*对称性所决定的数学理论的架构以及这个架构在物理学理论中的体现*”方面的思考。这一点，应该说和笔者主动承担《高等量子力学》课程的初衷是密不可分的。这里，笔者可以把这个初衷简单地描述一下：*从 2012 年入职北京大学以来，笔者一直负责讲授《群论 I》*

了笔者这个讲义的整理过程中，不可避免地要借助 AI 的工具，并在写作上，倾向于面对使用 AI 工具的读者。

[7]笔者的一个感触是人脑的作用还是要体现在“问题定位”与“价值判断”上。这里面不全是非黑即白的纯理性，也有一些审美的东西，体现的是人的特征。问题确定后，通过机器学习的方式寻找答案，是目前的计算机擅长的。关于这方面的一些思考，实际上对应的是物理学背后的哲学的内容。感兴趣的同学，可以参考笔者之前出版的《物理学是什么？从自然哲学到现代物理学》来进行了解【李新征，2026】。在那本书里，笔者比较详细地介绍了我们物理系的学生在学习物理学的时候应该进行什么样的哲学层面的思考？

[8]在教学和科研生涯中，笔者从来不 care 这些东西！现在，随着 AI 的兴起，相信多数同学也能感觉到我们可以把这个留给 AI，进而更加关注我们科研工作者作为人的价值。

*课程。基于自己整理的此课程的讲义，笔者于 2019 年出版了一本名为《群论及其在凝聚态物理中的应用》的教材。之后，结合读者反馈，在 2023 年，笔者开始准备第二版，并于 2024 年完成出版。第二版与第一版相比，笔者增加了“李群李代数初步”这样一章。在写这一章的过程中，笔者深刻地体会到了自己对《量子力学》的理解还非常地不到位。这在很大程度上限制了笔者所撰写的《群论》讲义的质量的进一步提高。**有些内容，笔者总是觉得自己一直想说但又说不出来**。出于这个考虑，笔者希望能够讲授一下《量子力学》相关课程，并在几年后将自己目前的这个《群论》讲义更新至第三版（应该就是最终版了）。*在与学院的几个老师沟通后，之前讲授《高等量子力学（英文版)》的张亿老师同意换课。于是，从 2024 年下半年开始，笔者开始准备《高等量子力学》的课程，并于 2025 年秋季学期完成了第一次教学尝试。

由于《高等量子力学》与《群论》同为我们国家物理学专业的研究生教育中的重要的基础课，它们之间又存在密不可分的联系，经历了一个学期的《高等量子力学》教学之后，加上自己之前有 13 年的担任《群论 I》课程主讲教师的教学经验[9]，笔者能感觉到“*如果这两门课的教材如果由同一个人以一种一致性比较强的方式来统一整理，对学生来讲应该是一件好事*”。但同时，笔者也能深切的感受到目前我们的教学计划中把《群论》、《高等量子力学》两个课程都当做研究生必修课在研究生一年级上学期同时开的安排实际上是不利于我们深度理解这

[9] 北京大学物理学院《群论》课程的教学是按两个学期计划的。《群论 I》从 2012 年到 2024 年由笔者负责，2024 年转给张亿老师，任务是讲解群论的基础知识。《群论 II》实际上就是《李群李代数》，往往由粒子物理专业背景的老师来承担。

两门课程的内容的[10]。在笔者看来，正确的顺序应该是先《量子力学》与《固体物理》，再《群论》，再《高等量子力学》。它们的关系是：《量子力学》与《固体物理》是《群论》课程的基础，而《群论》又是《高等量子力学》课程的基础。从《量子力学》开始，到《高等量子力学》结束，实际上是我们理解现代物理学理论的一个完美的闭环。在这个闭环中，《量子力学》、《固体物理》可以起到很好的辅助理解《群论》的作用。而《群论》又是我们对《量子力学》的理解进一步提高，进而学好《高等量子力学》的关键。《群论》和《高等量子力学》两个课程，则是我们开展具体科研的必要准备！

必须明确：上段讲的这个理解，笔者在讲授《高等量子力学》课程之前是没有的[11]。经过一个学期痛苦的教学，笔者坚信这个顺序是正确的！但笔者也需要承认，我们的很多同学在选课的时候，因为各种实际的考虑，并不是按这个顺序来选的。笔者在这里能做的，是给出自己的建议，教学过程中坚持自己的选择。毕竟，即便在北京大学，《高等量子力学》课程每年也都有两个主讲教师。全国范围来看，主讲教师更多。笔者只能把自己的课程当作一个选择来准备这个讲义。

在这个考虑的基础上，笔者就可以在我们这个《高等量子力学》讲义中把对称性放在一个非常重要的位置，在课程进行到适当的阶段，就会花更大精力强调。这些强调会包含很多关于空间、运动、对称变换、可观测量的内在意思的思考，以及它们之间的关系的讨论。这个时候，如果同时选《群论》与我的《高等量子力学》，学生在学习过程中可能会遇到问题。因为当我们学到这部分内容的时候，

[10]其实我们的教学规划中并没有规定这两门课要同时学。只是我们的学生往往习惯于同时学这两门课。在笔者讲授《高等量子力学》课程之前，笔者也一直错误地认为这两个课是应该一起上的。

[11]这种东西不讲课或许真的体会不到。这是一个认识的问题，我们国家现在的科研的层次的提高，实际上是到了要在这种认识上下功夫的时候了。

如果学生同时选《群论》而不是提前已经学过的话，或者同时选但没有把《群论》往前赶的话，还不能理解我们要讲的很多内容。如果出现这种情况，请选课的同学及时退课。同时，笔者也必须承认的是这种“两个讲义统一性的思路”很难用一页或者几页简短的文字在本书的开篇说清。*于是，“如何让学生沉下心来，通过一个学期的相互联系起来的《群论》课程与《高等量子力学》课程的学习来理解量子力学与对称性之间的内在联系”在笔者看来也就成了我们在教学中应该重点关心的问题。*当然，笔者必须承认对于学生而言，这个过程一定是枯燥的[12]。但同时，笔者也需要强调如果认真走完的话，回报应该会比较高！

第三个特点，是这本书会与前面提到的笔者近几年讲授的另外一门叫做《今日物理》的课程也密切相关。前面提到，从 2021 年春季学期，笔者开始担任北京大学物理学院开设的这门面向北京大学所有本科生的通识核心课的主讲教师[13]。基于这门课程的教学，笔者完成了一本名为《物理学是什么：从自然哲学到现代物理学》的通识读物【李新征，2026】[14]。此教材整体反映的是笔者通过《今日物理》这门课程的教学对物理学进行的一些重新思考。这些思考主要体现在*物理学的哲学属性、物理学史、以及今天物理学具有什么样的特点*这三个方面。其中，前两个方面（即物理学的哲学属性与物理学史）在笔者看来是我们目前的大学物理学教育中比较缺失的部分。而这两个部分，对于我们理解《量子力学》系列课程非常重要！实际上，早在笔者刚刚入职北京大学的时候，田光善老师就跟

[12]重要的理论的学习过程一定不可能是轻松的，这也是一条规律。同时，它也不是我们一遍就能学好的。

[13]这门课在上世纪 90 年代末由高崇寿先生开始，后经张酣教授传到笔者手中。

[14]那本书笔者觉得是可以作为《物理学史》这样的课程的参考读物在我们的一些高校中推广的。

笔者强调过很多次“*必须结合物理学史教《量子力学》*”。在讲授《今日物理》的过程中，笔者又总结出一些“*关于哲学的思考在量子力学发展过程中起到的作用*”的内容。

因为这个经历，笔者在 2025 年秋季学期讲授《高等量子力学》的过程中，在课程开始的时候，就采取了一种不同于传统教材的方式对“物理学与数学之间的关系”以及“十九世纪末之前欧洲的哲学与数学的发展对在物理学革命（二十世纪初）过程中做出了重要贡献的物理学家的影响”进行了讨论。但笔者必须承认，这种安排也带来了比较大的麻烦，就是学生会觉得它不像是一门《高等量子力学》课。实际上，一直到 2026 年五月，在笔者总结出来的讲义中，我们的第一章都是从“量子力学理论背后的哲学思考”开始的。2026 年 5 月 18 日，笔者在我们北京大学官微上看到一个关于北京大学物理学院《电动力学》课程教学团队的介绍。朱守华老师在采访中强调*课堂教学实际上是为了让学生与老师之间达成共识*。毫不夸张地讲，这一说法点醒了笔者。那一刻，笔者认识到自己过于看重自己的一些理解（这些理解或许也有偏执的地方）而忽略了与学生产生共识这一点。于是乎，笔者将之前整理好的这一章彻底删除，重新开始写。与之相应，本书体现这里我们讲的第三个特点的内容也进行了很大程度上的重组。

之所以这么讲，是因为笔者从这句话里面认识到自己 2025—2026 学年秋季学期的课堂教学失败很大程度上是因为自己太想跟学生讲清楚“课堂上的这些内容与科研之间的关系”以及“自己整理出来的这些内容背后的哲学思考”了。这些理解，是基于自己 30 年学习物理的一些感悟。它非常个人，完全非共识（和守华老师强调的关键点是矛盾的），不可能与刚刚开始科研的学生产生很好的共鸣。

就像我们的成长过程中，长辈说的很多话是有哲学思考的[15]，但我们往往在生活阅历不到的情况下不能理解这种思考，进而出发抵触行为。这个时候，从家长的角度，要想达到沟通的效果，交流的方法就很重要！类比教学过程，“度”的把握以及交流方式的选取就会是区分一个好的老师和一般的老师的关键点！换句话讲，要有科研的思考，要有哲学的思考，但也不能太多。在第一个学期，毫无疑问笔者在基本内容都没讲清楚的情况下把这部分内容讲的太多了。

这里，吸取教训，笔者在比较大的程度上改变了写法，删去了比较多的介绍“量子力学的发展史”以及“量子力学的哲学属性”的内容。但出于“度”的考虑，我们也进行了一定程度的保留。“有这部分内容”和“没有这部分内容”，在笔者看来，还是构成了本讲义与其它讲义的一个很重要的区别。这种思考实际上也会体现在我们第四章讲对称操作的时候的讲解方式上。相信我们的学生学到那个地方应该有体会。

第四个特点，笔者也不想回避，就是希望自己的科研经历在本讲义中也有体现。之所以要加这部分内容，并不是笔者对自己的科研有多满意，而是因为“以教促学，以学固教”是笔者的信仰。这里的“学”，实际上就是“科学研究”。笔者希望通过在课程上多讲一些自己的研究经历来帮助学生克服“上课”到“科研”之间的势垒，尽快完成一个向科研工作者的转变。

笔者的科研经历的特点是“第一性原理电子结构计算与相关的分子动力学模拟方法的发展与应用”。这里面，就有很多与我们《高等量子力学》课程相关

[15]虽然我们的长辈一般不会把它上升到哲学的高度。但按照冯友兰先生的“哲学是对人生的系统性的反思”这样一个观点，我们的长辈跟我们讲的就是哲学。这个时候，是会有很多并没有太多文化但是善于对人生进行思考的长辈跟我们说的话实际上是很有智慧的情况。我们的同学如果善于观察生活的话，应该可以体会到一些。

的内容。比如，在第一性原理的计算中，赝势是一个我们都会用到的东西。在笔者之前的科研工作中使用赝势的时候，笔者没有意识到它和我们《高等量子力学》课程中的“散射理论”之间的联系[16]。在 2025 年秋季学期讲完散射理论之后，笔者对赝势方法就有了一些新的认识（“分波法”中的“相移”在“赝势”的构造中实际上就是一个核心概念）。之前，笔者对“赝势”的认识仅仅停留在它是第一性原理电子结构计算的基础。那个时候，笔者经常会跟学生讲“我们第一性原理电子结构计算领域做的好的人，其中很多的博士论文或代表工作都与赝势有关[17]，他们对赝势方法的掌握对于他们开展第一性原理研究是有很大的好处的”。在教完《高等量子力学》之后，笔者会认为他们的这些基础对他们的影响实际上是超过他们所从事的第一性原理计算本身的。这种影响会延伸至他们的文章中体现的对整个凝聚态物理乃至物理学的思考方面。这些内容，在教《高等量子力学》课程之前，笔者在读他们的文章的时候是无法体会的。教完《高等量子力学》，笔者有了一些体会。之后，无法控制内心的喜悦，这里就尽量地写出来。

此外，笔者的博士课题是发展一个全电子的 *GW* 近似程序来描述固体中的单电子激发。从博士后开始，笔者进行过比较多的路径积分分子动力学方法的发展与应用研究。最近几年，课题组也在进行一些基于李-杨相变理论的相变研究。这些研究内容，应该说与我们课程中的路径积分方法、量子多体方法、对称性都

[16] 笔者甚至还写过一本分子模拟的书【李新征，2014】。在那本书里，笔者还介绍了如何产生一个 norm-conserving 的赝势？当时，笔者对这个问题的理解仅仅停留在数值操作的层面。笔者没有认识到这个背后的《高等量子力学》课程的内容。我们有很多做凝聚态计算的同行，笔者不能说我们都没理解。但从笔者平时和同行的接触，还是可以说很多同行是没有理解这一点的。

[17] 比如美国加州大学伯克利分校的 Steven Louie 教授、罗格斯大学的 David Vanderbilt，英国剑桥大学的 Chris Pickard 教授、奥地利维也纳大学的 George Kresse 教授。

密切相关。因此，笔者在讲到这些内容的时候，会忍不住的表达一些基于个人研究经历的思考[18]，特别是关于路径积分方法的思考。笔者认为这些思考对于读者以后在科研中应用《高等量子力学》课程的内容应该会有一些帮助。

基于如上考虑，从2026年1月1日起，在2025年秋季学期准备的课件的基础上，笔者开始按照上面四个特点来整理讲义。其整体内容，可以分为如下九章：

1. 量子力学的基本理论框架；
2. 量子动力学；
3. 二次量子化与量子多体问题；
4. 从对称性出发对量子力学数学结构的重新整理；
5. 角动量与自旋；
6. 散射理论；
7. 近似方法；
8. 路径积分；
9. 量子力学理论框架的简单扩展。

这九章内容整体而言是覆盖了我们国内多数高校的《高等量子力学》课程的教学大纲的。考虑到学习过程中要尊重认知规律，我们不可能在一开始的时候把所有的话都说的极其严格[19]。*作为一个不完美的老师，尊重内心理解，分享感悟，是*

[18]在笔者看来，我们的物理学专业教育简单讲的话无非三部分：在基础课阶段搞明白我们的课程与学科是怎么来的、在专业课阶段搞清楚学完这些课程内容后应该怎么用、之后通过科研实践来建立自信进而成为从业人员。因此，在课程教学中，如果能融入科研实践的内容，对于学生真正理解我们这个学科肯定是有帮助的。

[19]毕竟认知规律不是这样。说得太严格会让人产生距离感，进而无法真正接受很多内容。很多时候，我们或许应该采取一种近距离的感染式的讨论，把读者带入到一些帮助他/她们理解一些关键概念、建立理论框架的场景中。在这个理论框架建立后，我们再把之前没说清楚的一些事情进行一个拔高式的讨论。笔者这些年上课基本都是按这个来的，《群论》是典型的例子。

笔者希望在这里呈现的内容。笔者希望通过这些考量整理出来的讲义可以满足目前我国一部分物理学专业的同学对《高等量子力学》课程的学习需求[20]。

李新征

2026 年 9 月 4 日

[20]在笔者看来，大学课程教材越多样，学生越容易找到适合自己的，进而可以越顺利地进行学习。笔者在教学中很多时候并不是太追求严谨，这一点也会让不少同学诟病。但笔者一个真实的看法就是“教学和科研一样，或许特色才是最重要的那一点”。好的科研工作者不需要什么都知道，也不需要什么都说正确（更多情况下其实说不正确），但一定需要在一些方面有自己独特的、深入的思考。这里，笔者也还是坚持内心，把自己在科研中对特色的强调同样推广到自己的讲义。