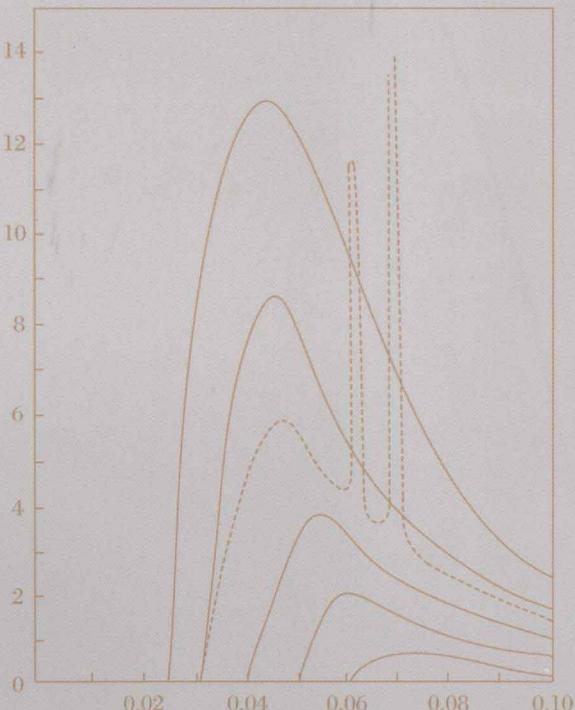


“十二五”国家重点图书出版规划项目

中国科学技术大学 精品 教材

# 量子力学基础

◎ 朱栋培 编著



中国科学技术大学出版社

“十二五”国家重点图书出版规划项目

中国科学技术大学  精品 教材

# 量子力学基础

Liangzi Lixue Jichu

朱栋培 编著

中国科学技术大学出版社

## 内 容 简 介

本书介绍了量子力学的基础知识,突出物质世界的运动规律,突出实验和观察,突出物理,突出物理的实用威力,力求使学生掌握自然的面貌和物理的方法而不是一堆数学公式,在每一主题的讲解中帮助学生领会图像、理解概念、熟练推理,从而逐步让学生学会在处理问题时构建图像、提炼概念、利用合适的推理工具演绎,最终又返回物理,落实在科学和技术的应用上.

本书内容包括:量子力学的诞生与发展、状态和薛定谔方程、力学量和表象、带电粒子在电磁场中的运动、近似方法、全同粒子、量子散射,并附有习题参考答案.为了方便读者使用,还添加了物理常量、元素周期表、常用积分和级数公式、常用函数和方程作为附录,并且对全书进行了名词索引.

本书适合高等院校相关专业本科生和准备考研深造的学生使用.

## 图书在版编目(CIP)数据

量子力学基础/朱栋培编著. —合肥:中国科学技术大学出版社,2012.8  
(中国科学技术大学精品教材)

“十二五”国家重点图书出版规划项目

ISBN 978 - 7 - 312 - 03042 - 0

I . 量… II . 朱… III . 量子力学 IV . O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 164795 号

中国科学技术大学出版社出版发行

安徽省合肥市金寨路 96 号,230026

<http://press.ustc.edu.cn>

安徽省瑞隆印务有限公司印刷

全国新华书店经销

开本:710 mm×960 mm 1/16 印张:30.5 插页:2 字数:581 千

2012 年 8 月第 1 版 2012 年 8 月第 1 次印刷

定价:55.00 元

## 总序

2008年,为庆祝中国科学技术大学建校五十周年,反映建校以来的办学理念和特色,集中展示教材建设的成果,学校决定组织编写出版代表中国科学技术大学教学水平的精品教材系列。在各方的共同努力下,共组织选题281种,经过多轮、严格的评审,最后确定50种入选精品教材系列。

五十周年校庆精品教材系列于2008年9月纪念建校五十周年之际陆续出版,共出书50种,在学生、教师、校友以及高校同行中引起了很好的反响,并整体进入国家新闻出版总署的“十一五”国家重点图书出版规划。为继续鼓励教师积极开展教学研究与教学建设,结合自己的教学与科研积累编写高水平的教材,学校决定,将精品教材出版作为常规工作,以《中国科学技术大学精品教材》系列的形式长期出版,并设立专项基金给予支持。国家新闻出版总署也将该精品教材系列继续列入“十二五”国家重点图书出版规划。

1958年学校成立之时,教员大部分来自中国科学院的各个研究所。作为各个研究所的科研人员,他们到学校后保持了教学的同时又作研究的传统。同时,根据“全院办校,所系结合”的原则,科学院各个研究所在科研第一线工作的杰出科学家也参与学校的教学,为本科生授课,将最新的科研成果融入到教学中。虽然现在外界环境和内在条件都发生了很大变化,但学校以教学为主、教学与科研相结合的方针没有变。正因为坚持了科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合的方针,并形成了优良的传统,才培养出了一批又一批高质量的人才。

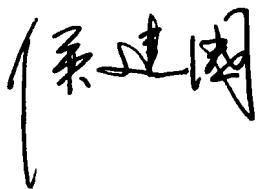
学校非常重视基础课和专业基础课教学的传统,也是她特别成功的原因之一。当今社会,科技发展突飞猛进、科技成果日新月异,没有扎实的基础知识,很难在科学技术研究中作出重大贡献。建校之初,华罗庚、吴有训、严济慈等老一辈科学家、教育家就身体力行,亲自为本科生讲授基础课。他们以渊博的学识、精湛的讲课艺术、高尚的师德,带出一批又一批杰出的年轻教员,培养

了一届又一届优秀学生。入选精品教材系列的绝大部分是基础课或专业基础课的教材，其作者大多直接或间接受到过这些老一辈科学家、教育家的教诲和影响，因此在教材中也贯穿着这些先辈的教育教学理念与科学探索精神。

改革开放之初，学校最先选派青年骨干教师赴西方国家交流、学习，他们在带回先进科学技术的同时，也把西方先进的教育理念、教学方法、教学内容等带回到中国科学技术大学，并以极大的热情进行教学实践，使“科学与技术相结合、理论与实践相结合、教学与科研相结合”的方针得到进一步深化，取得了非常好的效果，培养的学生得到全社会的认可。这些教学改革影响深远，直到今天仍然受到学生的欢迎，并辐射到其他高校。在入选的精品教材中，这种理念与尝试也都有充分的体现。

中国科学技术大学自建校以来就形成的又一传统是根据学生的特点，用创新的精神编写教材。进入我校学习的都是基础扎实、学业优秀、求知欲强、勇于探索和追求的学生，针对他们的具体情况编写教材，才能更加有利于培养他们的创新精神。教师们坚持教学与科研的结合，根据自己的科研体会，借鉴目前国外相关专业有关课程的经验，注意理论与实际应用的结合，基础知识与最新发展的结合，课堂教学与课外实践的结合，精心组织材料、认真编写教材，使学生在掌握扎实的理论基础的同时，了解最新的研究方法，掌握实际应用的技术。

入选的这些精品教材，既是教学一线教师长期教学积累的成果，也是学校教学传统的体现，反映了中国科学技术大学的教学理念、教学特色和教学改革成果。希望该精品教材系列的出版，能对我们继续探索科教紧密结合培养拔尖创新人才，进一步提高教育教学质量有所帮助，为高等教育事业作出我们的贡献。



中国科学技术大学校长  
中国科学院院士  
第三世界科学院院士

## 前　　言

本书是作者几十年来在中国科学技术大学讲授量子力学的产物，对象是大学本科生和准备考研深造的学生。

量子力学是近代物理的基础。一百多年来，深广的研究和成功的应用证明它是比较成熟的学科。其内容非常丰富，并且还在不断向前发展，方兴未艾，前途未可限量。量子物理不光是科学技术工程，它的一些概念、术语等还渗透到社会的各个方面，成为现代文明的基本语言。

虽然内容很多，但最重要、最有效的是学好它的基础。基本概念、基本规律、基本技能，这些基本的门道要烂熟于心、娴熟于手，然后才能举一反三，善于拓延，得心应手。基础的东西就那么几条，在基本功上下笨工夫，这是学好任何学问的不二法门。

近代的离不开经典的。量子力学是在经典物理的基础上发展起来的，但并非简单地延伸，有飞跃，有“相变”。要想学好它，思想观念上必须要有突破。要特别注意量子和经典的异同。从经典逻辑到量子逻辑这一跃变，掌握活的具体的辩证，是需要下特别工夫的。

如何才能学好“量子”？我以为要努力三悟：

言悟。这是通过眼耳来接纳量子力学。现在教科书非常多，任何一本都可以作为打基础的向导。网上则更是信息繁多。但我更愿意专心听人讲。任何讲的人总有他自己的体会。听过后再去看，岂非事半功倍？只有去听了，才会发现明师，而听明师一席话，胜读十年书。听人讲最好还是要记笔记，“好记性不如烂笔头”，这是自己在做初步的加工，是进一步钻研的原材料。

思悟。外来的东西，只有经过自己的头脑，才能加工成自己智慧仓库里的

武器,纳入自己的系统.“学而不思则罔”,必须对听来读来的材料深入思考和整理,弄清图像观念,前因后果,内涵外延,逻辑脉络,重点难点,边界关节,适用范围,理解、分析、综合、评价和推广,逐步使量子力学的基础了然于心,见微知著,得意欢喜,信受奉行.

行悟.物理学是实践的学问.学好“量子”必须动手操作实践,把理念转到行动,以检验,以精确,以熟练,以发展.学得好不好,用过就知道.没有经过实际检验的东西充满泡沫,是经不住考验的,正所谓“绝知此事要躬行”.在大学里,这行动包括做习题和课题研究.做习题要精练,努力提高效率,一题多解,一解多题.

虽然教了几十年,虽然感觉不断有所进步,但我自知对量子力学的了解还很肤浅.教学相长,教学过程中形式多样、强度各异的相互作用使我很享受.感谢师长、同事和学生,感谢他们穿越我生命的时空,留下那么多丰富生动的美好记忆!

朱栋培

2012年3月于中国科学技术大学

# 目 录

总序 .....	( i )
前言 .....	( iii )
<b>第1章 量子力学的诞生与发展 .....</b>	( 1 )
1.1 光的波粒二象性 .....	( 2 )
1.1.1 黑体辐射与能量子 .....	( 2 )
1.1.2 光电效应与光量子 .....	( 4 )
1.2 微粒的波粒二象性 .....	( 7 )
1.3 量子力学的发展 .....	( 11 )
习题 1 .....	( 12 )
<b>第2章 状态和薛定谔方程 .....</b>	( 14 )
2.1 状态和波函数 .....	( 14 )
2.1.1 微观系统运动状态 .....	( 14 )
2.1.2 归一化 .....	( 15 )
2.1.3 态叠加原理 .....	( 17 )
2.1.4 动量空间波函数 .....	( 18 )
2.2 薛定谔方程 .....	( 20 )
2.2.1 薛定谔方程 .....	( 20 )
2.2.2 定态 .....	( 23 )
2.2.3 概率守恒 .....	( 24 )
2.3 一维定态问题 .....	( 26 )
2.4 一维无限高方势阱 .....	( 33 )
2.4.1 方势阱 .....	( 33 )
2.4.2 分区解 .....	( 34 )
2.4.3 连接条件 .....	( 35 )

2.4.4	能级和波函数	( 36 )
2.4.5	物理意义	( 37 )
2.4.6	动量分布与平均值	( 39 )
2.4.7	一般状态波函数	( 39 )
2.4.8	二维方阱	( 40 )
2.4.9	两个粒子	( 40 )
2.5	有限深对称方势阱	( 41 )
2.6	隧道效应	( 46 )
2.6.1	一维势阶散射	( 46 )
2.6.2	散射边界条件	( 47 )
2.6.3	反射系数与穿透系数	( 48 )
2.6.4	趋肤效应	( 49 )
2.6.5	势垒贯穿	( 50 )
2.6.6	隧道效应	( 52 )
2.6.7	共振穿透	( 53 )
2.6.8	势阱情形	( 53 )
2.6.9	一维多量子垒	( 54 )
2.7	$\delta$ 势	( 55 )
2.7.1	$\delta$ 函数	( 55 )
2.7.2	吸引 $\delta$ 势阱	( 56 )
2.7.3	束缚态	( 57 )
2.7.4	导数跳跃条件	( 57 )
2.7.5	束缚态能级与波函数	( 58 )
2.7.6	反射系数和穿透系数	( 58 )
2.7.7	散射幅中的束缚态	( 59 )
2.7.8	$\delta$ 势垒	( 59 )
2.7.9	动量空间解法	( 59 )
2.7.10	多 $\delta$ 势	( 60 )
2.8	周期势	( 61 )
2.8.1	周期势	( 61 )
2.8.2	Floquet 定理	( 62 )
2.8.3	Bloch 定理	( 63 )

2.8.4 能带 .....	( 64 )
2.8.5 Kronig-Penney 模型 .....	( 65 )
2.8.6 狄拉克梳.....	( 67 )
2.9 谐振子 .....	( 69 )
2.9.1 简谐振子.....	( 69 )
2.9.2 能级和波函数 .....	( 71 )
2.9.3 半谐振子.....	( 73 )
2.9.4 三维各向同性谐振子 .....	( 73 )
2.10 转子 .....	( 75 )
2.10.1 转子 .....	( 75 )
2.10.2 周期边界条件及解 .....	( 76 )
习题 2 .....	( 77 )
<b>第3章 力学量和表象 .....</b>	<b>( 79 )</b>
3.1 力学量的平均值 .....	( 80 )
3.1.1 坐标平均值.....	( 80 )
3.1.2 动量平均值.....	( 81 )
3.1.3 算符 .....	( 82 )
3.1.4 能量平均值.....	( 84 )
3.2 算符 .....	( 84 )
3.2.1 算符运算.....	( 85 )
3.2.2 线性算符.....	( 85 )
3.2.3 对易关系和反对易关系 .....	( 86 )
3.2.4 本征值和本征波函数 .....	( 87 )
3.2.5 本征值谱与简并度 .....	( 88 )
3.2.6 厄米算符.....	( 88 )
3.2.7 厄米算符的重要性质 .....	( 91 )
3.2.8 力学量用线性厄米算符代表 .....	( 93 )
3.3 均方差和本征态 .....	( 93 )
3.3.1 均方差 .....	( 93 )
3.3.2 本征态 .....	( 94 )
3.3.3 代表力学量的算符的线性特征 .....	( 95 )
3.4 基本算符 .....	( 96 )

3.4.1	坐标算符	(96)
3.4.2	动量算符	(98)
3.4.3	海森堡代数	(100)
3.4.4	动量算符的物理意义	(100)
3.4.5	角动量算符	(101)
3.4.6	球谐函数	(105)
3.4.7	一般力学量	(109)
3.4.8	能量算符	(110)
3.4.9	宇称算符	(111)
3.5	力学量本征态的完备性	(112)
3.5.1	叠加态的分布	(113)
3.5.2	本征态的完备性	(114)
3.5.3	连续谱情形	(115)
3.5.4	一般谱	(116)
3.5.5	完备性关系	(117)
3.5.6	量子力学第三假定	(118)
3.6	态空间和表象	(119)
3.6.1	态空间	(119)
3.6.2	力学量的表示	(120)
3.6.3	矩阵表示	(121)
3.6.4	狄拉克记号	(123)
3.6.5	酉变换	(125)
3.6.6	物理性质的表示无关性	(128)
3.7	状态的完全确定	(129)
3.7.1	自由度问题	(129)
3.7.2	共有完备本征态的条件	(131)
3.7.3	完全力学量组(CSCO)	(133)
3.8	不确定关系	(134)
3.8.1	实验分析	(135)
3.8.2	两种分布	(136)
3.8.3	理论证明	(137)
3.8.4	应用	(139)

3.9 图像 .....	(141)
3.9.1 薛定谔图像.....	(141)
3.9.2 形式解 .....	(141)
3.9.3 守恒量 .....	(142)
3.9.4 对称性 .....	(144)
3.9.5 海森堡图像.....	(147)
3.9.6 Feynman-Hellmann 定理 .....	(148)
3.9.7 位力定理.....	(151)
3.9.8 相互作用图像 .....	(152)
3.10 粒子数表象中的谐振子 .....	(153)
3.10.1 吸收算符和发射算符 .....	(154)
3.10.2 粒子数算符的本征态 .....	(155)
3.10.3 各算符的矩阵形式 .....	(157)
3.10.4 谐振子谱 .....	(159)
3.10.5 状态波函数 .....	(159)
3.10.6 相干态 .....	(160)
习题 3 .....	(162)
<b>第 4 章 带电粒子在电磁场中的运动 .....</b>	<b>(167)</b>
4.1 粒子在有心力场中的运动 .....	(167)
4.1.1 有心力场.....	(167)
4.1.2 径向波函数 .....	(168)
4.1.3 束缚态 .....	(171)
4.1.4 束缚态幂次对应关系 .....	(172)
4.2 氢原子 .....	(174)
4.2.1 库仑势 .....	(174)
4.2.2 氢原子 .....	(178)
4.2.3 电子云 .....	(181)
4.3 其他有心力场 .....	(184)
4.3.1 无限高球阱 .....	(184)
4.3.2 有限深球阱 .....	(187)
4.3.3 三维各向同性谐振子 .....	(189)
4.3.4 若干简单的球对称势 .....	(191)

4.4 玻姆-阿哈拉诺夫效应 .....	(191)
4.4.1 带电粒子在电磁场中运动的哈密顿量 .....	(191)
4.4.2 运动方程 .....	(192)
4.4.3 概率守恒 .....	(193)
4.4.4 规范变换 .....	(194)
4.4.5 玻姆-阿哈拉诺夫效应 .....	(195)
4.5 朗道能级 .....	(198)
4.5.1 不对称规范 .....	(199)
4.5.2 守恒量和简并 .....	(200)
4.5.3 反磁性 .....	(201)
4.5.4 对称规范 .....	(201)
4.6 原子磁矩和塞曼效应 .....	(204)
4.6.1 原子磁矩 .....	(204)
4.6.2 塞曼效应 .....	(206)
4.6.3 理论解释 .....	(207)
4.7 电子自旋 .....	(208)
4.7.1 施特恩-格拉赫实验 .....	(208)
4.7.2 钠原子光谱线的精细结构 .....	(211)
4.7.3 电子自旋假设 .....	(212)
4.7.4 自旋波函数 .....	(213)
4.7.5 自旋算符 .....	(214)
4.7.6 自旋在任意方向投影的波函数 .....	(217)
4.7.7 泡利方程 .....	(218)
4.7.8 自旋磁矩在磁场中的转动 .....	(218)
4.8 角动量理论 .....	(220)
4.8.1 角动量算符的本征值和矩阵表示 .....	(220)
4.8.2 自旋角动量算符 .....	(225)
4.9 角动量的耦合 .....	(226)
4.9.1 两个角动量的耦合 .....	(226)
4.9.2 矢量耦合系数(C-G 系数) .....	(231)
4.9.3 自旋角动量的耦合 .....	(233)
4.10 自旋轨道耦合和能级精细结构 .....	(234)

4.10.1 托马斯耦合 .....	(234)
4.10.2 CSCO .....	(235)
4.10.3 角向本征波函数——球旋量 .....	(236)
4.10.4 一般解 .....	(237)
4.10.5 能级修正 .....	(238)
4.10.6 相对论动能修正 .....	(239)
4.10.7 波函数零点值修正 .....	(241)
4.10.8 光谱项符号 .....	(242)
4.11 自旋电子的塞曼效应 .....	(243)
4.11.1 原子总磁矩 .....	(243)
4.11.2 总磁矩在总角动量方向的投影 .....	(244)
4.11.3 自旋电子的塞曼效应 .....	(245)
4.11.4 反常塞曼效应 .....	(247)
4.11.5 帕邢-巴克效应 .....	(248)
习题 4 .....	(249)
<b>第 5 章 近似方法 .....</b>	<b>(253)</b>
5.1 定态微扰理论(非简并态) .....	(254)
5.1.1 基本方程 .....	(254)
5.1.2 一级微扰修正 .....	(257)
5.1.3 二级微扰修正 .....	(258)
5.1.4 微扰论适用条件 .....	(259)
5.1.5 弱电场中的带电谐振子 .....	(260)
5.1.6 非谐振子 .....	(262)
5.1.7 对称谐振子高阶修正 .....	(264)
5.1.8 氢原子基态能级的超精细结构——原子氢 21 厘米线 .....	(265)
5.2 定态微扰论(简并态) .....	(267)
5.2.1 简并态微扰论 .....	(267)
5.2.2 几点讨论 .....	(269)
5.2.3 耦合振子 .....	(270)
5.2.4 弱电场中的电偶极矩 .....	(271)
5.2.5 对称破缺 .....	(275)
5.3 斯塔克效应 .....	(275)

5.3.1 外电场中的氢原子 .....	(275)
5.3.2 基态的微扰 .....	(276)
5.3.3 激发态能级的修正 .....	(277)
5.4 含时微扰论 .....	(279)
5.4.1 含时微扰论 .....	(280)
5.4.2 简谐微扰 .....	(282)
5.4.3 氢原子的电离 .....	(285)
5.5 磁共振 .....	(288)
5.5.1 自旋进动 .....	(288)
5.5.2 海森堡图像 .....	(289)
5.5.3 电子自旋共振(ESR)精确解 .....	(290)
5.5.4 电子自旋共振近似解 .....	(294)
5.5.5 电子自旋共振技术 .....	(295)
5.6 原子辐射 .....	(296)
5.6.1 哈密顿量 .....	(296)
5.6.2 电偶极近似 .....	(297)
5.6.3 吸收系数和发射系数 .....	(298)
5.6.4 选择定则 .....	(300)
5.6.5 自发辐射 .....	(301)
5.6.6 激发态寿命 .....	(303)
5.7 激光 .....	(305)
5.7.1 激光基本原理 .....	(305)
5.7.2 形成激光的基本条件 .....	(306)
5.7.3 激光特点 .....	(308)
5.7.4 自由电子激光 .....	(310)
5.8 绝热近似 .....	(310)
5.8.1 瞬时本征态 .....	(311)
5.8.2 绝热近似 .....	(312)
5.8.3 漂移振子 .....	(312)
5.8.4 弛豫振子 .....	(314)
5.8.5 玻恩-奥本海默近似 氢分子离子 $H_2^+$ .....	(315)
5.8.6 贝尔相位 .....	(324)

5.9 变分法 .....	(327)
5.9.1薛定谔方程的变分描述 .....	(327)
5.9.2利兹变分法 .....	(329)
5.9.3示例 .....	(330)
习题5 .....	(336)
<b>第6章 全同粒子 .....</b>	<b>(338)</b>
6.1 全同粒子和泡利原理 .....	(338)
6.1.1 全同粒子 .....	(338)
6.1.2 交换对称 .....	(339)
6.1.3 泡利原理 .....	(340)
6.2 全同粒子体系的波函数 .....	(341)
6.2.1 无作用多粒子体系的波函数 .....	(341)
6.2.2 玻色子系统的波函数 .....	(342)
6.2.3 费米子系统的波函数 .....	(342)
6.2.4 空间和自旋可分开的情形 .....	(343)
6.3 氦原子 .....	(344)
6.3.1 氦原子的光谱和能级 .....	(344)
6.3.2 氦原子基态能量粗估 .....	(346)
6.3.3 微扰论计算的氦原子基态能量 .....	(347)
6.3.4 变分法计算的氦原子基态能量 .....	(348)
6.3.5 自旋耦合与交换简并 .....	(350)
6.3.6 基态、单重项与三重项 .....	(353)
6.3.7 选择定则 .....	(354)
6.3.8 交换能 .....	(355)
6.3.9 氦原子的激发态能级 .....	(356)
6.4 元素周期表 .....	(358)
6.4.1 泡利原理对组态的要求 .....	(359)
6.4.2 原子的壳层结构 .....	(361)
6.4.3 自旋轨道耦合 .....	(362)
6.4.4 几个特点 .....	(363)
6.5 X射线 .....	(369)
6.5.1 X射线的发现 .....	(369)

6.5.2 韧致辐射谱	(370)
6.5.3 线状特征谱	(371)
6.5.4 原子的内层能级	(373)
6.5.5 俄歇效应	(374)
6.5.6 X 射线的吸收	(374)
6.5.7 产生 X 射线的各种机制	(375)
<b>6.6 氢分子和化学键</b>	<b>(377)</b>
6.6.1 离子键	(377)
6.6.2 共价键	(379)
6.6.3 氢分子	(380)
6.6.4 极性键	(381)
<b>习题 6</b>	<b>(382)</b>
<b>第 7 章 量子散射</b>	<b>(385)</b>
<b>7.1 散射和截面</b>	<b>(385)</b>
7.1.1 散射过程	(385)
7.1.2 经典散射截面	(387)
7.1.3 量子散射截面	(389)
7.1.4 散射边界条件	(390)
7.1.5 微分截面和总截面	(390)
7.1.6 质心系与实验室系	(392)
<b>7.2 分波法</b>	<b>(393)</b>
7.2.1 方程决定的渐近行为	(393)
7.2.2 平面波的球面波展开	(395)
7.2.3 散射振幅和截面	(395)
7.2.4 光学定理	(397)
7.2.5 分波近似	(397)
7.2.6 量子硬球散射	(399)
7.2.7 球壳散射	(400)
7.2.8 势阱散射与共振散射	(402)
<b>7.3 玻恩近似</b>	<b>(409)</b>
7.3.1 玻恩近似	(409)
7.3.2 适用条件	(412)