



高等 学 校 规 划 教 材
工 科 电 子 类

量子力学

刘柯林 编



东南大学出版社

0413.1
53

量子力学

刘柯林

东南大学出版社

(苏)新登字第 012 号

内 容 简 介

本教材是为适应工科电子类专业的教学而编写的。全书共分六章，简要地回顾了量子论的实验基础，介绍了量子力学的基本原理及其数学描述，以及微扰论与变分法，弹性散射，自旋与多粒子体系等内容。

本书选材符合少而精的原则，内容取舍合理。由于吸收了近年来国内外量子力学教学讨论的成果，讲述基本概念清楚明确，对学生可能发生困难的地方作了较详细的说明，并有一定数量的计算训练，从而改善了教材的可读性。

本书也可作为工科其它专业以及师范院校的教材或参考书。

责任编辑 王小然

量 子 力 学

刘柯林

东南大学出版社出版发行

(南京四牌楼 2 号 邮编 210018)

江苏省新华书店经销 溧阳市印刷厂印刷

*

开本: 850×1168 毫米 1/32 印张 6.8125 字数 153 千

1993 年 8 月第 1 版 1993 年 8 月第 1 次印刷

印数: 1—1200 册

ISBN 7—81023—813—2/O·72

定价: 3.30 元

(凡因印装质量问题，可直接向承印厂调换)

出版说明

根据国务院关于高等学校教材工作的规定，我部承担了全国高等学校和中等专业学校工科电子类专业教材的编审、出版的组织工作。由于各有关院校及参与编审工作的广大教师共同努力，有关出版社的紧密配合，从1978~1990年，已编审、出版了三个轮次教材，及时供给高等学校和中等专业学校教学使用。

为了使工科电子类专业教材能更好地适应“三个面向”的需要，贯彻国家教委《高等教育“八五”期间教材建设规划纲要》的精神，“以全面提高教材质量水平为中心，保证重点教材，保持教材相对稳定，适当扩大教材品种，逐步完善教材配套”，作为“八五”期间工科电子类专业教材建设工作的指导思想，组织我部所属的九个高等学校教材编审委员会和四个中等专业学校专业教学指导委员会，在总结前三轮教材工作的基础上，根据教育形势的发展和教学改革的需要，制订了1991~1995年的“八五”（第四轮）教材编审出版规划。列入规划的，以主要专业主干课程教材及其辅助教材为主的教材约300多种。这批教材的评选推荐和编审工作，由各编委会或教学指导委员会组织进行。

这批教材的书稿，其一是从通过教学实践、师生反映较好的讲义中经院校推荐，由编审委员会（小组）评选择优产生出来的，其二是在认真遴选主编人的条件下进行约编的，其三是经过质量调查在前几轮组织编写出版的教材中修编的。广大编审者、各编审委员会（小组）、教学指导委员会和有关出版社，为保证教材的出版和提高教材的质量，作出了不懈的努力。

限于水平和经验，这批教材的编审、出版工作还可能有缺点和不足之处，希望使用教材的单位，广大教师和同学积极提出批评和建议，共同为不断提高工科电子类专业教材的质量而努力。

电子工业部电子类专业教材办公室

前 言

本教材系按电子工业部的工科电子类专业教材 1986~1990 年编审出版规划, 由电子材料与固体器件教材编审委员会半导体物理与固体器件编审小组审定, 责任编委简跃光, 后因故在“七五”期间未能出版, 经电子部电子类专业教材办公室批准, 转入“八五”计划, 并改由东南大学出版社出版。

本教材由东南大学刘柯林担任主编, 北京理工大学惠和兴担任主审。

本课程的参考学时为 50 学时, 其主要内容包括: 引言、波函数和薛定谔方程、量子力学中的力学量、微扰论与变分法、弹性散射以及自旋与多粒子体系等六章。

在引言部分, 介绍了实物粒子的波粒二象性, 并以此为贯穿全书的线索。第二章则从不同侧面对波粒二象性展开讨论, 通过对几种简单模型的分析, 揭示量子化现象的本质。第三章引进算符表示力学量, 对量子力学进行数学描述。第四、五两章介绍量子力学中处理问题的方法: 在第二、三章束缚态分立能谱精确解的基础上, 第四章介绍了逐步近似求解方法, 分别给出了非定态和定态的处理; 自由态的处理则在第五章讨论。第六章讨论自旋和全同粒子问题。

本书把讲述量子力学的基本概念和基本原理以及对物理图象的分析作为重点, 对学生必须掌握的数学内容也作了较详细的讲述。力图使学生对量子力学的基本概念、基本原理及其数学描述有较系统的了解, 对量子化现象有较深刻的认识, 熟悉处理典型问题的方法, 掌握一些重要的理论结论, 为进一步学习打下基础。

本教材在编写过程中, 得到北京理工大学惠和兴先生和清华

大学陈弘毅先生的具体帮助，与西安交大刘秉钧先生进行了有益的讨论。谨表示诚挚的感谢。

目前国内已有许多适应不同对象的量子力学教材。其中以周世勋先生的《量子力学教程》和曾谨言先生的《量子力学》影响最为深广。本书在编写过程中除参考以上两本教材外，还参考了以下书籍：

蔡建华 《量子力学》(上)

张恽慈 《量子力学简明教程》

泡令、威尔孙 《量子力学导论》

玻姆 《量子理论》

保罗·A·蒂普勒 《近代物理基础及其应用》

限于编者的水平，难免有错误和不妥之处，如蒙批评指正，将不胜感谢。

编者、

1989年12月

目 录

1 引言	(1)
1.1 量子论的实验基础	(1)
1.2 微粒的波粒二象性	(7)
2 波函数和薛定谔方程	(12)
2.1 波函数的统计意义	(12)
2.2 薛定谔方程	(19)
2.3 一维无限深势阱	(23)
2.4 一维谐振子	(30)
2.5 势垒贯穿	(38)
3 量子力学中的力学量	(45)
3.1 算符的本征值和本征函数	(45)
3.2 力学量的算符表示	(49)
3.3 算符与力学量的关系	(52)
3.4 坐标算符与动量算符	(57)
3.5 角动量算符	(63)
3.6 力学量同时有确定值的条件 不确定关系	(66)
3.7 L^2 及 \hat{L}_z 的本征值和本征函数	(71)
3.8 电子在库仑场中的运动	(74)
3.9 氢原子的能级和波函数	(79)
3.10 简单塞曼效应	(84)
3.11 状态和力学量的表象	(86)
3.12 量子力学公式的矩阵描述	(93)
4 微扰论与变分法	(97)
4.1 含时微扰	(97)

4.2	跃迁概率	(100)
4.3	光的吸收和辐射	(104)
4.4	选择定则	(110)
4.5	非简并定态微扰	(113)
4.6	简并情况下的微扰	(119)
4.7	变分法	(124)
5	弹性散射	(127)
5.1	散射截面	(127)
5.2	分波法	(133)
5.3	方势阱与势垒的散射	(138)
5.4	玻恩近似	(142)
6	自旋与多粒子体系	(147)
6.1	电子自旋	(147)
6.2	自旋算符	(150)
6.3	自旋波函数	(154)
6.4	角动量的合成	(157)
6.5	光谱的精细结构	(162)
6.6	全同粒子体系	(165)
6.7	全同粒子系的波函数	(167)
6.8	两个电子的自旋波函数	(171)
6.9	一维多粒子体系	(176)
6.10	氢分子 共价键	(178)
	习题	(187)
	附录	
	A 分析力学简介	(195)
	B 厄米多项式	(205)
	C δ 函数	(207)
	D 勒让特函数	(209)

1 引言

19 世纪末与 20 世纪初，经典物理学理论（牛顿力学、热力学及统计物理学、电动力学）已取得重大成就。一般的物理现象都可以从相应的理论中得到说明。但与此同时，人们相继发现了一些新的物理现象，它们直接冲击了经典物理学中一些看来是不容置疑的基本观念，揭露了经典物理学的局限性。本章将简要地叙述一些实验事实及其推论，以便读者了解其中孕育的量子论的基本思想。

1.1 量子论的实验基础

1.1.1 普朗克的量子假定

一切宏观物体都以电磁波的形式向外辐射能量。实验表明，物体在一定时间内辐射的能量以及辐射能按波长的分布都跟物体温度 T 有关，因而这种辐射就称为热辐射。为了描述各种物体的热辐射，我们把单位时间内从物体表面单位面积上所辐射的波长在 λ 到 $\lambda+d\lambda$ 区间内的辐射能 dE_λ 与波长间隔 $d\lambda$ 之比，叫做物体的单色辐射本领。

$$e(\lambda, T) = \frac{dE_\lambda}{d\lambda}$$

当辐射能入射到某一不透明的物体表面上，一部分能量被物体吸收，另一部分能量则从表面上反射。物体吸收能量和反射能量与入射能量之比，分别叫做该物体的吸收系数与反射系数。如果一个物体对任何波长的入射辐射能都能全部吸收，就称这物体是绝对黑体（简称黑体）。实验表明，任何物体的辐射本领与其

吸收系数之比都等于同一温度下绝对黑体的辐射本领，这个结论称为基尔霍夫定律。因此，确定黑体的辐射本领 $e_0(\lambda, T)$ 就成了研究热辐射的中心问题。

能否从理论上求得黑体单色辐射本领的函数表达式，是 19 世纪末物理学中引人注目的问题之一。许多人根据经典物理学的原理和辐射机理的一些特殊假设，分别求出了 $e_0(\lambda, T)$ 的几种表达式，但都因与实验不符而失败了。

1900 年，普朗克找到了一个开始是纯粹经验的公式，称为普朗克公式。这个公式给出了寻求黑体辐射能量按波长分布的数学表达式。它和实验符合得很好。然而，为了从理论上推导出这个公式，必须作一个背离经典理论的假设：黑体由带电的线性谐振子组成，这些谐振子的能量不能连续变化，只能取一些离散值。这些离散值是最小能量 ε 的整数倍，即 $0, \varepsilon, 2\varepsilon, \dots, n\varepsilon$ ，称为谐振子的能级。当谐振子从这些能级之一过渡到其它能级时，就发射或吸收辐射能量 $n\varepsilon = h\nu$ ，每份能量与振子的频率 ν 成比例，比例常数 h 称为普朗克常数。 $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ ，可由多种实验方法测定。

按照经典理论，带电谐振子的能量正比于其振幅的平方，振幅可以连续变化，从而振子能量应当连续变化。因此，普朗克的假设是经典物理学根本无法解释的。但是为了得到正确的黑体辐射公式，这个假设又是必不可少的。根据上述假设，普朗克得出黑体辐射公式为

$$e_0(\lambda, T) = 2\pi hc^2 \lambda^{-5} \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} \quad (1-1)$$

式中 c 为光速， k 为玻尔兹曼常数。黑体辐射本领 $e_0(\lambda, T)$ 与 λ 的关系如图 (1-1) 所示。可以证明，单色辐射本领 $e(\nu, T)$ 与能量密度 $\rho(\nu, T)$ 之间的关系是

$$\rho(\nu, T) = \frac{4e(\nu, T)}{c}$$

再由 $\lambda = \frac{c}{\nu}$, $|d\lambda| = \frac{c}{\nu^2} d\nu$, 以及 $e(\lambda, T)d\lambda = e(\nu, T)d\nu$ 等关系, 可以将式 (1-1) 表示为

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1-2)$$

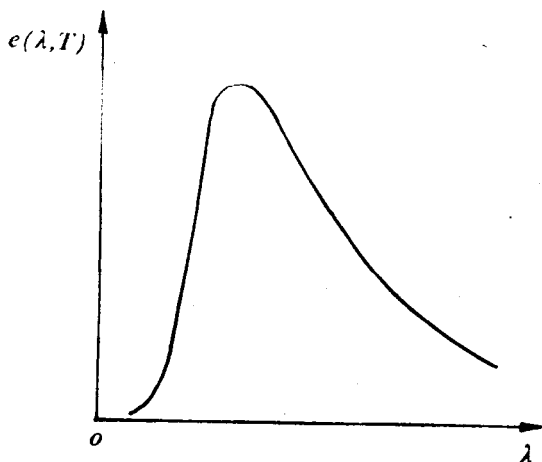


图 1-1 黑体的单色辐射本领

普朗克提出的能量谐振子假设, 冲破了经典物理的束缚, 解决了经典物理学的困难, 为现代物理学奠定了基础。

1.1.2 原子的核式结构

在 20 世纪初, 人们就已经知道电子是原子的组成部分。但物质通常是中性的, 足见原子中还带有与电子等量的正电荷。J.J. 汤姆逊提出了一个原子结构模型, 设想原子带正电部分均匀分布在原子内, 成为体带电球, 而电子则嵌在其中。

α 粒子的散射实验却否定了汤姆逊模型。观测表明, 被散射的 α 粒子数随散射角 θ 的增大而迅速减少, 但即使在 θ 接近 180° 时, 散射 α 粒子数也不为零。为了解释大角散射这一事

实，需要假定原子中的正电荷是集中在比原子体积小得多的体积内，即集中在原子核内。原子核的半径约为 10^{-14}m ，但根据其它实验所确定的原子的线度是 10^{-10}m 。那么在原子内电子又如何分布呢？卢瑟福提出了原子的“行星”模型：原子中的电子不停地绕着核转动。

然而行星模型在电动力学上是不稳定的。电子作圆周运动时具有加速度，加速运动的电子必然辐射电磁波，从而使电子不断损失能量，最后电子将落到核上！经典物理学再次遇到了不可克服的困难。

1.1.3 原子光谱线系

原子光谱是原子内部电子运动情态的反映。当原子被电火花、电弧、火焰或其它方法激发时，能够发射出一系列具有一定频率（或波长）的光谱线。这些光谱线就构成了原子光谱。最简单的原子光谱是氢光谱。它用波数 $\tilde{\nu}$ 表示为

$$\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$
$$(n > m; n, m = 1, 2, 3, \dots)$$

式中 R_H 是黑德伯常数。

从经典物理的角度来看，光是原子中绕核运动的电子发出的电磁波。原子中电子最一般的运动形式是椭圆运动。即使承认这一运动是稳定的，它等于在两个相互垂直的方向上同频率的周期运动的合成，所以电子的辐射应由基频和一些谐频组成。但是在氢光谱中各条谱线的频率并不是成倍数关系。如果考虑到电子因辐射电磁波而损失能量，使得轨道逐渐缩小，电子不是作严格的周期运动，那么电磁辐射应形成连续谱而不是线状谱。这表明，要用经典理论来解释原子光谱也是不可能的。

1.1.4 玻尔的氢原子理论

玻尔在 1913 年对氢原子光谱作出了理论解释。他采用原子的行星模型，为了解决经典物理学与原子稳定性的矛盾，他假定

电子在原子中不可能沿着经典理论所允许的每一条轨道运动，而只能沿着其中一组特殊的轨道运动。沿这一特殊轨道运动的电子处于稳定状态（简称定态）。每一定态对应一确定的能量。处于定态的电子不吸收也不辐射能量。只有当电子从一个定态跃迁到另一个定态时，才产生辐射的吸收或发射现象。当电子由能量为 E_m 的定态跃迁到能量为 E_n 的定态时，所吸收或发射的辐射频率 ν 满足下述关系：

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} \quad (n > m) \quad (1-3)$$

为了从经典力学所允许的状态中挑选电子可能的运动状态，玻尔提出了轨道量子化条件：

$$\oint p dq = nh \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1-4)$$

p 和 q 是表示电子运动状态的两个参数， q 是电子的广义坐标， p 是与之相应的广义动量。正整数 n 称为量子数。轨道量子化条件表明，只有积分 $\oint p dq$ 等于 h 的整数倍的那些运动状态才能存在。

设电子作圆周运动，取极角 φ 为广义坐标，则相应的广义动量为角动量 L 。电子在中心力场中运动，角动量守恒，由式(1-4)

$$\int_0^{2\pi} L d\varphi = L \int_0^{2\pi} d\varphi = 2\pi L = nh$$

$$L = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (1-5)$$

式中 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ 是量子力学中常用的符号。式(1-5)表明，符合经典力学的可能轨道中，只有角动量为 \hbar 整数倍的那些轨道才实际存在。

玻尔理论解释了原子结构的稳定性，同时成功地解释了氢原子的线光谱。但是玻尔的基本假设与经典物理学是完全不相容的。玻尔理论在解释更复杂的原子光谱时遇到了困难，因此为后

来发展起来的量子力学所代替，但定态的概念和量子跃迁的概念在量子力学中被保留了下来。

1.1.5 光的粒子性

早在 17 世纪末，关于光的本性就有两种说法，一是牛顿的微粒说，认为光是作直线运动的微粒；另一是惠更斯的波动说，认为光是由光源在其周围介质里引起弹性振动而形成的波。到了 19 世纪，又发现了光的干涉、衍射和偏振等物理光学现象。后来麦克斯韦创立了光的电磁波理论，证明了光波本质上也是一种电磁波，这才确立了光的波动理论。

19 世纪末，发现光照射到金属上，金属中的电子吸收了光的能量而脱出金属表面的现象。这种电子称为光电子，这种现象称为光电效应。

实验发现，对一定的金属，只有用高于某一频率的光照射时才有光电子逸出，即存在一个“红限”。按照经典电磁理论，光照射到金属上，金属中的电子在光波作用下作受迫振动。电子从光波中吸收足够大的能量就可脱离金属。只要入射光足够强，就足以提供发射光电子所需要的能量。光电效应对各种频率的光都应当发生。并且计算表明，作受迫振动的电子积累能量到脱离金属所需要的时间远大于发生光电效应的时间。因此经典物理学在解释光电效应上又遇到了困难。

1905 年，爱因斯坦在普朗克量子论的启发下，发表了光子学说，认为光除了波动性之外，还具有微粒性，电磁辐射的能量不仅在被发射和吸收时以 $h\nu$ 为单位不连续地发生，而且在传播过程中也是以能量为 $h\nu$ 的微粒在空间运动的，微粒运动的速度等于光速 c 。这种粒子叫做光量子，简称为光子。用这个观点，爱因斯坦成功地解释了光电效应。

因此光既是波，因为解释干涉和衍射现象必须用光的波动理论，但它又是粒子，解释黑体辐射现象和光电效应必须采用光的微粒学说。也就是说，光是波动和微粒的统一体。这种性质称为光的波粒二象性。把光的这两重性质联系起来的关系式称为爱因

斯坦关系:

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1-6)$$

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k} \quad (1-7)$$

式中 E 和 \mathbf{p} 是光子的能量和动量, ω 和 \mathbf{k} 是光波的角频率和波矢, $|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda}$, \mathbf{n} 表示沿光子运动方向的单位矢量。

1.2 微粒的波粒二象性

1.2.1 德布罗意假设

由于经典物理学在解释微观现象上遇到困难, 迫使人们去寻找反映微观粒子运动规律的新理论。在光的本性研究上, 人们发现光不仅有波动性, 还有粒子性。这些便启示了德布罗意于 1924 年提出微观粒子也有波粒二象性的假设: 一个运动的实物粒子 (指静止质量不等于零的粒子) 总是与一个波动相联系, 与运动的实物粒子相联系的波叫做物质波, 后来人们又称它为德布罗意波。

德布罗意把粒子和波通过下面的关系联系起来, 粒子的能量 E 和动量 \mathbf{p} 与波的频率 ν 和波长 λ 之间的关系, 正如光子和光波的关系一样:

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1-8)$$

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k} \quad (1-9)$$

这两式称为德布罗意关系。

德布罗意的假设是否正确, 必须由实验加以检验。电子和其它实物粒子在一定条件下发生的衍射和干涉现象, 证实了德布罗意假设的正确性。

1913 年, 布拉格提出了一种 X 射线衍射的理论。他证明晶体中原子组成的一个平面 (叫做布拉格面) 反射辐射的方式, 与

平面镜反射光的方式相同。若入射波束与平面夹角为 θ ，考虑从间距为 d 的两个平行的相邻布拉格平面上反射的辐射，从图 1-2 可以看出，从两个面分别反射出来的两个射线束有可能发生相长干涉。其条件是两射线束之间的光程差 $2d\sin\theta$ 等于波长的整数倍，即

$$n\lambda = 2d\sin\theta \quad (1-10)$$

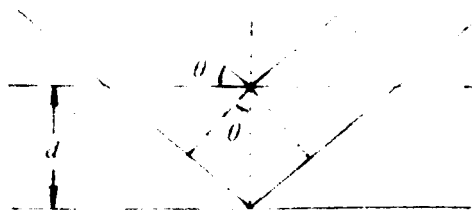


图 1-2 光在布拉格面上的反射

戴维孙和革末将 54eV 的电子束射到镍单晶上，而镍单晶的原子间距已知为 0.125nm。他们测量了散射电子强度随散射角变化的关系。如果没有衍射效应，随着散射角的增大，散射电子强度会单调减少，决不会在某些角度上出现大量电子。但事实上他们发现，在散射角为 50° 的地方，散射电子的强度有一个明显的峰值。按式 (1-10) 计算得到的波长值与德布罗意波长相符。

汤姆逊研究电子穿过薄金属片的透射，发现透射电子束产生

同心圆状的衍射图样，这只能用电子也具有波动性来解释。紧接着完成的热中子衍射实验也支持了德布罗意假设。

图 1-3 示出了一个描述物质波干涉的实验。

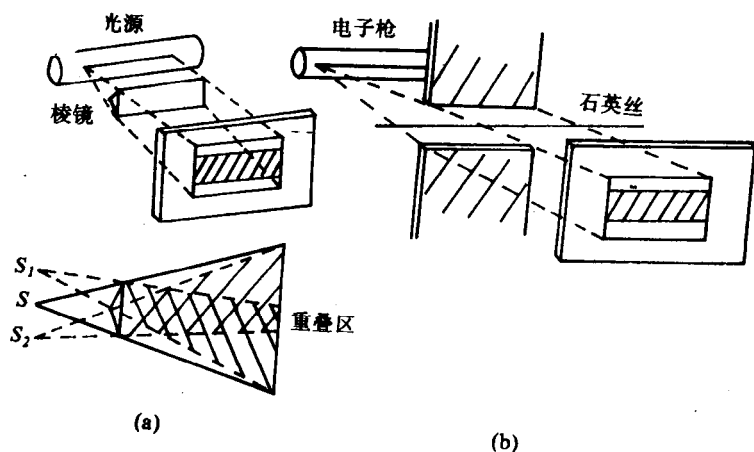


图 1-3 物质波干涉实验

图(a)就是菲涅尔双棱镜实验。借助一个玻璃双棱镜的折射，把从狭缝 s 发出的一束光弯折成两半：上半部分向下弯折，好象是从 s_1 发出的一样；下半部分向上弯折，好象是从 s_2 发出的一样。这两束光在照像底片处重叠，在重叠区观察到明暗相间的干涉条纹。图(b)的电子源是一个 20000V 的电子枪，它提供德布罗意波长为 0.0086nm 的电子。电场“双棱镜”是用一个直径几微米的镀银石英丝张挂在金属屏的宽缝正中而成。使石英丝对于金属屏保持正 6V 的电压，电场使通过石英丝上下两侧的电子分别向下和向上弯折。两束电子在照像底片处发生重叠，恰如分别从两个电子源发出的一样。电子路径的曲折情况同把电子当作单纯的带电粒子时完全一样，但在两束电子流交叠的地方出现明暗相间的干涉条纹，与光的干涉一样。