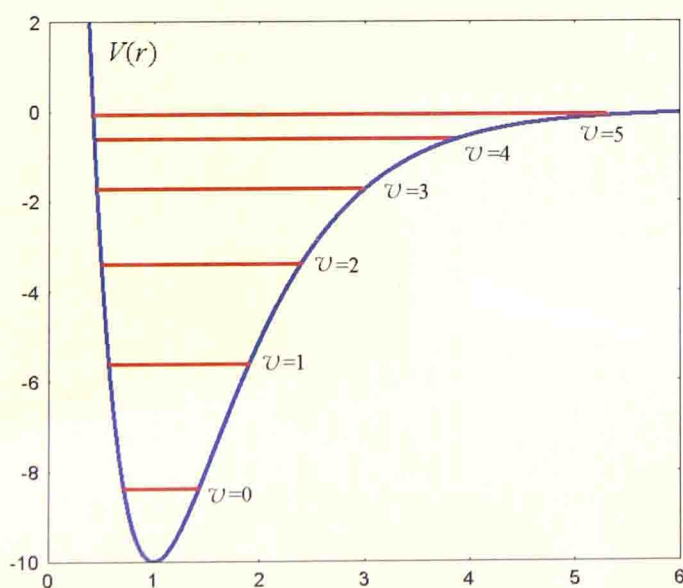


量子力学 I

Quantum Mechanics I

〔德〕顾樵 (Qiao GU) 著



科学出版社

量子力学 I

Quantum Mechanics I

〔德〕顾樵 (Qiao GU) 著



科学出版社

北京

内 容 简 介

本书是一部内容丰富、贯通中西的综合性量子力学专著,根据作者 20 多年来在德国和中国开设量子力学讲座和相关研究成果提炼而成。全书共 17 章,划分为六个层次:背景知识,基本理论,基本理论问题的新解法,重要专题讨论,扩展到其他学科,联系到最新进展和前沿课题。全书注重自身理论体系的科学性、严谨性、完整性与实用性。将中国传统教材与国外先进教学内容相结合;将量子力学的纵向演化与知识现状相结合;将基本理论问题与相应的解法相结合;将概念性表述与专题讨论相结合;将应用实践与其他学科相结合;将基础性知识与最新进展和前沿课题相结合。既为教学所用,又适应科研需要。附有大量不同类型的综合性例题,便于不同层次读者从中学习和掌握分析问题、解决问题的思路与方法。量子力学 I 为前 8 章,量子力学 II 为第 9~第 17 章。

本书适合作为物理学和相关理工科专业的本科生和研究生的教材,可供高等院校教师和科研院所技术人员在理论研究与工程技术中使用,也可供具有一定物理学及数学基础的自学者自修,还可供在国外学习的本科生、研究生及访问学者参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学 I = Quantum Mechanics I (德)顾樵著. —北京:科学出版社, 2014. 6

ISBN 978-7-03-040971-3

I. ①量… II. ①顾… III. ①量子力学 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 121860 号

责任编辑:刘凤娟 / 责任校对:胡小洁

责任印制:钱玉芬 / 封面设计:耕 者

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京佳信达欣艺术印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014 年 6 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2014 年 6 月第一次印刷 印张:20 3/4 插页:1

字数:401 000

定价:88.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)



物理学教授 顾樵博士

前 言

量子力学是描述微观粒子(分子、原子、原子核、基本粒子等)运动规律的理论,它是在量子假设和实验事实的基础上建立起来的。与牛顿力学、麦克斯韦电动力学、爱因斯坦相对论力学的建立方式迥然不同,由于量子理论的复杂性,它不是由一个人而是由多个国家的一群人建立、发展和完善起来的。量子力学的创立,作为多方智慧的融合与结晶,是人类科学发展史上最有魅力、最激动人心的篇章之一。它是一部最有标新立异、最具奇思妙想、最富诗情画意的科学思想史;也是一门严格、自洽、完整、实用的物理学理论。那么,人类的创造力如何超越自身的想象力,从而铸就这一空前辉煌的科学丰碑?

量子论的哲学思想有悖传统的思维方式,它的基本观点至今没有渗透到大众的意识中去,这给它蒙上了一道神秘的面纱,使许多人望而却步。我作为一介学习、研究、应用量子理论长达 30 年之久的“老兵”,面对量子力学的“神奇莫测”曾无数次陷于“迷惑”之中(玻尔语:“If you are not confused by quantum physics then you haven't really understand it.”);当然也常常因为领悟到它的奥妙与精彩而兴奋不已。我愿意带着自己的感受,与广大读者一起,一步步地踏入量子力学这座神秘而流光溢彩的科学殿堂,去领略和欣赏由众多大师精心雕琢而成的那一件件具有艺术美感的科学瑰宝。

量子力学的起源可以追溯到 1900 年。这一年德国物理学家马克思·普朗克提出了“量子”概念并建立了著名的黑体辐射公式,这标志着一个新的物理学时代的开始。一个多世纪以来,量子理论已经开辟了极为广阔的科学天地,固体物理学、量子统计力学、量子场论、量子电动力学、量子色动力学、量子电子学、量子光学、量子信息学、量子化学、量子生物学等应运而生。再看看周围的世界,伴随我们这一代人的成长,高科技产业层出不穷:电子显微镜、半导体、激光器、电视、电子计算机、电子通信、光纤通信、超导材料和各种新型材料、核磁共振成像等。它们的出现和应用已经极大地推进了人类的物质文明和精神文明。而所有这一切,无一不同量子力学相联系!

20 多年前我来到德国,一直从事生物光子学(属于量子生物学)的研究、应用与开发。由于自身理论物理的学术背景以及研究所的工作需要,也经常开设一些学术讲座,主讲数学物理方法和量子力学。对于所使用的外文教材,作为一个注重严密逻辑推理的中国教授,我感到系统性与缜密性不足。因此,我总是按照自己认定的内容与方式授课,与学生手中的教材大相径庭。

近年来,我常回中国讲学。除了介绍国外科学前沿与高新技术,也讲授数学物理方法和量子力学等基础课程。所用的通常是中文教材,面对母语颇感亲切。但对于一个熟谙西方治学方法的学者,又觉得欠缺灵活性与实用性。所以我的授课依然与学生的课本不相配合。而且不提供课件。学生给我发邮件诉求:“说句真心话,听顾老师的课是一种享受,您讲课太棒了!不知您能否把课件上传,这样我们复习就可以节约一些时间。”问题还是没有称心如意的教材。许多学生以及听课教师问我为什么不出版自己的教材。我的想法是,有写教材的时间,不如去钻研重要的生物光子学课题。

但是,这样的想法随着听课人数的不断增加发生了改变,授课与课本不相配合产生的负面作用越来越明显,学生普遍感到压力很大。于是,我渐渐萌生了写书的念头。就在这时,我发现不少学生已经设法将我的课件复制下来并传到网上。这说明学生们对课件的喜爱,但孰不知其中很多原创内容尚未公开发表。这个情况使写书的念头突然间上升为一种冲动。其实,平心而论,作为一名定居海外多年的学者,在讲学和研究之余,能为祖国留下几本教科书,以飨众多中国读者,也是一件很有意义的事情。

成书后的《量子力学 I》和《量子力学 II》是一套综合性专著。按内容分成 17 章,但就知识结构而言可以划分为以下六个层次:

(1) 背景知识。在综述经典物理学(特别注重对量子力学直接有用的知识)的基础上,讲述量子力学的背景知识(附以真实有趣的历史故事),涉及量子概念与黑体辐射、光电效应与康普顿散射、原子结构与玻尔理论、物质波(波粒二象性)与波动力学。

(2) 基本理论。包括波函数与薛定谔方程,一维束缚态的性质,一维无限深势阱,势垒贯穿,线性谐振子,力学量的算符表示,类氢离子(氢原子),厄米算符(对易关系和测不准原理),表象变换与矩阵力学表述,微扰论,光的吸收与发射,散射问题,全同粒子与自旋,二次量子化等。

(3) 基本理论问题的新解法。例如,利用德布罗意关系和亥姆霍兹方程推导定态薛定谔方程,用哈密顿算符的本征方程导出薛定谔方程的形式解,用驻波条件计算一维无限深势阱的本征能量,用傅里叶变换法求解 δ 势阱中的束缚态(包括双 δ 势阱和三重 δ 势阱),用薛定谔方程的数值解论证谐振子的量子化条件,谐振子问题的算符代数法及本征函数的合流超几何函数表示,类氢离子径向本征函数的合流超几何函数表示,用傅里叶变换法推导测不准关系,用格林函数法求解薛定谔方程进而讨论散射问题的玻恩近似,用算符代数法讨论角动量问题(导出角量子数取整数和半整数两种情况)。

(4) 重要专题讨论。例如,自由粒子波包(包括自由粒子波包的箱归一化处理),原子核的 α 衰变,量子共振腔,电子流的加速,双势阱模型(中央势垒取低能和高能两种情况),普薛耳-特勒势(复指标连带勒让德函数、束缚态和无反射势),双

曲正切势(超几何函数和反射系数),惰性气体分子的伦纳德-琼斯势,双原子分子的莫尔斯势与振动能级,普薛耳-特勒势阱(束缚态和极限行为),谐振子高斯波包的周期性振荡,无限深球形势阱(黎卡提-贝塞尔函数),碱金属原子的能级和波函数,密度算符与力学量的平均值,动量波函数(自由粒子的动量波函数、一维无限深势阱的动量波函数、基态氢原子的动量波函数等),利用能量-时间测不准关系讨论激光的相干性,卢瑟福散射的经典与量子理论,无损耗传输线与单模辐射场的量子化,氢原子能级的精细结构(狄拉克方程和相对论量子力学微扰论)。

(5) 扩展到其他学科。例如,分子物理学(克拉策分子势及分子的振动-转动能级),激光物理(光放大机制和激光的量子特性),固体物理(电子气模型和能带论),量子统计力学(玻尔兹曼统计、费米-狄拉克统计、玻色-爱因斯坦统计、化学势与费米能级、光子统计与热辐射、声子与德拜模型、库珀对与超导现象等),半导体物理(载流子、导带、价带、有效质量、迁移率等),量子光学(光子数态、混沌态、相干态、压缩态、非经典光等)和量子信息学。

(6) 联系到最新进展和前沿课题。例如,超大分子的波动性,有机物的着色机制(共轭链系统中的 π 电子),扫描隧道显微镜和原子力显微镜,双势阱中的周期性势垒贯穿(振荡频率为 10^{14} Hz 的光学钟),中微子振荡(一般双态问题),哈密顿替代法(微扰论),合作自发发射(超荧光和超辐射),光子晶体(光在周期性介质中的传播、色散曲线、光子晶体光纤),石墨烯(具有完美晶格结构的二维材料、能带结构、零带隙半导体、奇异的量子效应),薛定谔猫态(相干态之间的量子干涉),量子纠缠态(一个体系的微观状态与宏观状态的耦合),量子退相干,杰恩斯-卡明斯模型(单模辐射场与单个二能级原子的相互作用)和穿衣态,腔 QED 和量子计算机,反物质及应用(肿瘤的诊断和治疗、反物质燃料、反物质武器等)。

学习量子力学有一个潜在性问题,即所谓培养“量子空间想象力”。中学学习立体几何的时候,老师经常说培养“空间想象力”。它指的是由一个几何体的数学描述想象它的三维构象。什么是“量子空间想象力”? 量子世界是看不见的,在没有量子力学知识的情况下去想象量子世界,一定会下意识地沿袭经典物理学的思路。这样你无法想象下列现象:

- 量子体系的能量不是连续而是分立变化的,基态的能量是非零的,在基态之下没有状态存在;

- 微观粒子在运动中可以贯穿高能量的势垒,出现透射现象;

- 谐振子可以出现在振幅以外的区域;

- 氢原子中的电子可能出现在空间的任何位置(不限于玻尔轨道);

- 电子不但有轨道角动量,还有自旋角动量,而自旋角动量在空间任何方向

上的投影只能取两个值,即 $\pm \frac{1}{2}\hbar$;

.....

这些经典物理学中不可思议的“奇怪”现象正是量子理论的自然结果。这些知识和理念需要在求解各种量子体系中不断积累,与此同时,一种“量子空间想象力”就在逐渐培养之中。当你认真求解和深入讨论四、五个典型的量子体系之后,你的量子空间想象力就在潜移默化中产生了。你就会努力想象一个微观体系在那个看不见的量子空间所展示的种种特性。

可见,求解量子体系(特别是求解薛定谔方程)是至关重要的。毫无疑问,这中间要用到大量的数学知识。求解物理问题就像工匠干活一样,得心应手的工具可以使操作变得很简单。求解一个量子体系如果没有专用的数学工具而仅凭数学分析之类,就像用螺丝刀装卸汽车轮胎一样。所以学习量子力学之前(或与此同时)必须学习和掌握相关的数学知识。顺便说,本人编著的《数学物理方法》(科学出版社,2012年1月出版,2014年2月第三次印刷)正是这套《量子力学 I》和《量子力学 II》的数学基础。这两本书可谓姊妹篇,内容上密切相关,写作风格也保持一致。当然还有许多优秀的专著可供参考,如柯朗和希尔伯特的专著《数学物理方法》(中译本,科学出版社,2011年出版)。

与通常的量子力学教科书不同,本书作为一部综合性专著所涉及的内容相当广泛,本科教学中可根据课时和需要加以取舍。书中所述知识绝非一个学期就可以完全掌握,需要长期反复思考与练习,所以本书对硕士生和博士生同样有用。另外,本人根据自己的经历深深感到,即使是从事相关教学、科研或工程技术多年的专业人员,也常常需要查阅量子力学的基础性知识。所以既为教学所用,又适应科研需要,是本书的宗旨。书中列出大量例题,读者可从中感受和领会解决实际问题的思路与方法。却没有像普通教科书那样附上练习题。实际上授课老师寻找一些练习题布置给学生(或者学生自找练习题)并非一件难事。

本专著物理论述及数学推导简明、直观、详尽、易懂,可以作为各类人员的自学教材及参考书。

在多年的学术讲座和授课中,国内外不少学生、听课教师和其他听课人员提出许多有意义的问题,使本书内容日臻丰富,在此向他们致谢。另外,作者感谢与 Fritz A. Popp 教授的有益讨论,与他在德国国际生物物理研究所多年的学术合作使我受益匪浅。本人自 1977 年读大学以来,在 30 多年的科学生涯中一直受到妻子张爱华的全力支持和悉心关照,谨此表示由衷的感谢。

顾樵

Prof. Dr. Qiao GU (Chief Scientist)

gu-qiao@gmx.de

International Institute of Quantum Biology

Haßloch, Germany

20 March 2014

目 录

前言

第 1 章 量子力学基础	1
1.1 经典物理学综述	1
1.1.1 牛顿力学	1
1.1.2 热力学与统计物理	3
1.1.3 光学	8
1.1.4 电磁学与电动力学	10
1.2 作用量子与黑体辐射	15
1.2.1 作用量子与黑体辐射	15
1.2.2 黑体辐射的实验规律	17
1.2.3 黑体辐射的理论研究	18
1.2.4 普朗克黑体辐射公式	20
1.3 光电效应与康普顿散射	28
1.3.1 光电效应	28
1.3.2 康普顿散射	30
1.4 原子结构与玻尔理论	35
1.4.1 电子的发现	35
1.4.2 原子的结构	37
1.4.3 原子的玻尔理论	41
1.5 物质波与波动力学	46
1.5.1 德布罗意物质波理论	46
1.5.2 电子波动性的实验观测	49
1.5.3 超大分子的波动性	50
1.5.4 波粒二象性	53
1.5.5 波动力学的建立	54
第 2 章 波函数与薛定谔方程	56
2.1 波函数	56
2.1.1 从“轨道”到“概率”	56
2.1.2 波函数的性质	58
2.1.3 力学量的平均值和期待值	62
2.2 薛定谔方程	65

2.2.1 自由粒子波函数	65
2.2.2 薛定谔方程的建立	67
2.2.3 定态薛定谔方程	70
2.2.4 本征解的性质	71
2.2.5 一个简单的推导方法	74
2.3 薛定谔方程的一般解	74
2.3.1 束缚态:本征态的叠加	74
2.3.2 散射态:自由粒子波包	79
2.4 一维束缚态的性质	93
2.4.1 一维束缚态问题	93
2.4.2 能级的非简并性	94
2.4.3 本征函数为实函数	95
2.4.4 本征函数的正交性	95
2.4.5 本征函数的完备性和封闭性	96
2.4.6 一般解与能量期待值	97
第3章 一维势场模型	99
3.1 无限深势阱模型	99
3.1.1 模型的求解	99
3.1.2 本征函数和本征能量	101
3.1.3 典型例题	106
3.1.4 含时问题的一般解	108
3.2 半无限深势阱模型	114
3.2.1 模型的求解	114
3.2.2 束缚态能量	115
3.2.3 束缚态波函数	119
3.3 有限深势阱模型	120
3.3.1 模型的求解	120
3.3.2 非对称势阱	123
3.4 散射态问题	125
3.4.1 阶跃势场	125
3.4.2 方形势垒	129
3.5 势垒贯穿	133
3.5.1 势垒贯穿	133
3.5.2 原子核的 α 衰变	135
3.6 δ 势场中的束缚态与散射态	137

3.6.1 狄拉克 δ 函数	137
3.6.2 δ 势阱中的束缚态	138
3.6.3 δ 势垒散射	144
3.6.4 无限深势阱中的 δ 势垒	146
第4章 一维势场模型的应用	151
4.1 量子共振腔	151
4.1.1 腔模与激发模	151
4.1.2 腔模的放大与抑制	154
4.1.3 量子共振腔	155
4.2 电子流的加速	158
4.2.1 行波解: $1/3$ 阶汉克尔函数	158
4.2.2 电子流的加速	159
4.3 双势阱模型: 低势垒情况	160
4.3.1 偶宇称态和奇宇称态	160
4.3.2 分立谱和本征函数	163
4.3.3 体系的极限行为: 连续谱	166
4.4 双势阱模型: 高势垒情况	168
4.4.1 分立谱和本征函数	168
4.4.2 量子振荡现象	171
4.4.3 势垒强度对体系能量的影响	172
4.4.4 量子振荡频率	174
4.4.5 体系的极限行为: 独立双势阱	174
4.5 普薛耳-特勒势	175
4.5.1 复指标连带勒让德函数	175
4.5.2 束缚态	176
4.5.3 散射态: 无反射势	179
4.6 双曲正切势场	181
4.6.1 超几何函数	181
4.6.2 反射系数	183
4.7 有机物着色问题	186
4.7.1 π 电子的特性	186
4.7.2 共轭系统的吸收谱	187
4.7.3 有机物着色的机制	189
4.8 隧穿效应的应用	190
4.8.1 冷电子发射	190

4.8.2	热核聚变	191
4.8.3	隧道二极管	192
4.8.4	扫描隧道显微镜	193
4.8.5	原子钟	193
4.8.6	化学与生物方面的应用	194
第 5 章	量子谐振子	196
5.1	谐振子模型	196
5.1.1	谐振子:从经典到量子	196
5.1.2	模型的求解:厄米多项式	198
5.2	量子谐振子的性质	205
5.2.1	量子化条件:薛定谔方程的数值解	205
5.2.2	本征函数	208
5.2.3	概率密度	212
5.2.4	含时问题的一般解	218
5.3	合流超几何函数	221
5.4	谐振子:算符代数法	222
5.4.1	降阶算符和升阶算符	223
5.4.2	基态和任意本征态	225
5.4.3	归一化常数	226
5.4.4	本征函数的表达式	227
5.4.5	本征函数的正交性	229
第 6 章	谐振子模型的应用	232
6.1	伦纳德-琼斯势:惰性气体分子	232
6.2	莫尔斯势:双原子分子	234
6.2.1	谐振子近似	234
6.2.2	精确解	236
6.2.3	双原子分子的振动能级	239
6.3	普薛耳-特勒势阱	241
6.3.1	谐振子近似	241
6.3.2	精确解	243
6.3.3	体系的极限行为	245
6.4	谐振子波包的振荡:光学钟	247
6.5	原子力显微镜	250
第 7 章	力学量的算符表示	252
7.1	算符的基本知识	252

7.2 厄米算符	255
7.2.1 厄米算符的定义和性质	255
7.2.2 厄米算符的本征函数	258
7.3 具有连续谱的本征函数	259
7.3.1 动量本征函数	259
7.3.2 坐标本征函数	262
7.4 箱归一化	263
7.4.1 具有分立谱的动量本征函数	263
7.4.2 本征函数的封闭性和完备性	266
7.4.3 应用举例:自由粒子波包	267
7.5 角动量算符	268
第8章 三维空间的量子力学	272
8.1 三维束缚态问题的一般解	272
8.2 角向解	273
8.2.1 中心势场	273
8.2.2 连带勒让德函数	275
8.2.3 球谐函数	278
8.3 径向解	281
8.3.1 库仑场中的束缚态	281
8.3.2 广义拉盖尔多项式	286
8.3.3 合流超几何函数	289
8.4 本征函数、概率密度与一般解	290
8.5 氢原子	292
8.5.1 氢原子光谱	292
8.5.2 径向概率密度:电子轨道	293
8.5.3 角向概率密度:电子云	300
8.5.4 电流密度和磁矩	301
8.6 无限深球形势阱	303
8.7 碱金属原子	306
8.7.1 价电子的能级	306
8.7.2 基态:波函数和径向概率密度	308
8.7.3 极限情况	309
8.8 双原子分子:克拉策分子势	310
8.8.1 谐振子近似	310
8.8.2 精确解	311

8.8.3 分子的振动-转动能级	316
------------------------	-----

量子力学 II

第 9 章 测不准原理	319
第 10 章 表象与矩阵力学	367
第 11 章 微扰论	401
第 12 章 原子与光场相互作用	433
第 13 章 散射	451
第 14 章 角动量与自旋	469
第 15 章 全同粒子与固体	496
第 16 章 辐射场的量子态	542
第 17 章 相对论量子力学与反物质	583
索引	602

第 1 章 量子力学基础

自 1900 年德国物理学家马克思·普朗克(Max Planck)提出“量子”概念并建立黑体辐射公式以来,量子力学已经走过了 100 多年。量子理论在众多科学和技术领域取得了巨大的成功。今天,我们应当如何理解和掌握这门重要学科的核心思想与基本原理?法国著名实证主义哲学家奥古斯特·孔德(Auguste Comte)指出:“要了解一门科学,必须知道它的历史。”如果只注重横向地了解一门知识,而忽略追踪这门知识的纵向演化,这是一种缺憾。不知道一门科学的历史,就不可能透彻理解它的现状。本章在综述经典物理学基本知识的基础上,介绍量子力学产生、发展和完善的历史过程。这些背景知识对于理解量子理论体系的建立具有十分重要的意义。

1.1 经典物理学综述

在历史上,经典物理学(classical physics)经过两个多世纪的发展,到 19 世纪末叶已经达到它的鼎盛时期。这表现在诸多物理学科的建立、完善及其广泛的应用。主要涉及牛顿力学、热力学与统计物理、光学、电磁学与电动力学。本节对经典物理学的基本知识予以综述,它们对于量子力学(quantum mechanics)的建立具有重要的奠基作用。

1.1.1 牛顿力学

首先,1687 年牛顿(Newton)在其著名的《自然哲学的数学原理》一书中,对万有引力和质点动力学的三个定律进行了细致的描述。特别是牛顿第二定律在数学上表示为

$$\mathbf{F}=m \frac{\mathrm{d}^2 \mathbf{r}}{\mathrm{d} t^2} \quad (1.1.1)$$

其中, m 表示质点的质量, $\mathbf{r}$ 是质点在时刻 t 的位移,而 $\mathbf{F}$ 则是质点受到的合力。牛顿力学的研究思路是非常明确的:只要知道了质点的初始位移 $\mathbf{r}(0)$ 和初始动量 $m\dot{\mathbf{r}}(0)$,通过求解微分方程(1.1.1),就可以得到任意时刻的位移 $\mathbf{r}(t)$,并进而得到任意时刻的动量 $m\dot{\mathbf{r}}(t)$ 。因此牛顿力学(Newtonian mechanics)的物理图像是质点的轨道(图 1.1.1),反映在哲学上,则是因果律(causality)。在这里,初始条件与微分方程同属“因”,二者是同等重要的。牛顿力学在当时解决了无数个工程上的

问题,没有遇到任何理论上的障碍。因此物理学家中普遍存在一种乐观的情绪,认为力学在物理上已经发展到尽头了,已经成为所谓“经典力学”(classical mechanics),剩下的问题“只是求解微分方程而已”。

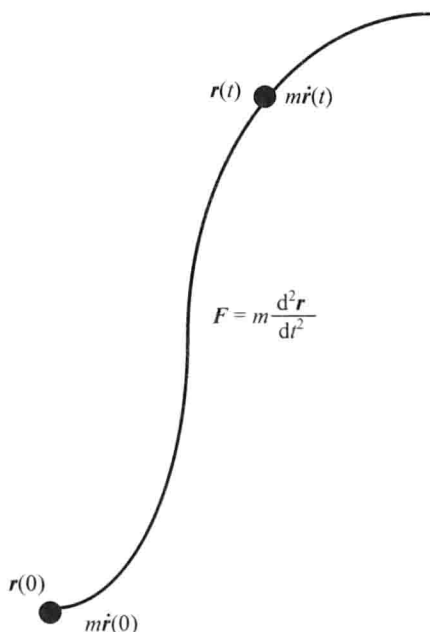


图 1.1.1 牛顿力学的物理图像:质点的轨道

经典力学的巨大成功还表现在物理模型(physical model)的成功。经典力学的主要研究对象是“质点”(particle),质点是一个“几何点”:只有位置和质量,没有大小。但是,质点动力学可以用来描述天体的运行,如月亮和地球的运动。特别是,牛顿力学的质点模型直接导致了海王星的发现(Neptune's discovery)。

海王星作为太阳系的第八行星,其发现过程非常奇特。之前发现的众多行星,都是首先通过肉眼或望远镜观测,然后根据观测数据,计算出运动轨道。而海王星的情况恰恰相反,它的发现是根据太阳系的第七颗行星天王星运动轨道观测值与理论计算结果不相符合的事实,推测太阳系应该还有一颗未知行星。然后按照计算的结果,用望远镜去观测,果然在预言的位置发现了太阳系的第八行星——海王星。海王星的发现是牛顿力学质点模型最重要、最激动人心的科学成果。

“质点”是一个最基本、最抽象、最实用的物理模型。一般来讲,物理模型的基本特点在于:

- (1) 它概括了大量实际系统所共有的最为本质的特点;
- (2) 它相对于实际系统简化到了极点;
- (3) 物理模型的精确解可以描述无数实际系统的物理状态和变化规律。

模型是物理学的精髓,也是物理学内在之美的具体表现。什么是“美”?“简单”才是美。正如美学大师埃迪·蒙托(Idee Monto)所说:“Less is more.”简单是

一种境界,简单是一种超脱,简单其实并不简陋,并不单薄。

1.1.2 热力学与统计物理

经典物理学的另一学科是热力学和统计物理。热力学(thermodynamics)也有以下三大定律。

(1) 热力学第一定律是能量守恒与转化在热力学系统中的表现。它表达为外界传给系统的热量等于系统内能的增加和对外做功的总和。如果外界传递给系统的热量为 Q , 使系统经某一过程从平衡态 I 到平衡态 II, 内能的增加为 $U_{II} - U_I$, 同时对外界做功 A , 则热力学第一定律可以表示为

$$Q = (U_{II} - U_I) + A \quad (1.1.2)$$

(2) 热力学第二定律指出了一切与热现象有关的宏观过程的不可逆性, 它的最直观的表述是, 热量不可能自动地由低温物体向高温物体传递。而热现象总是与大量分子的无规则热运动相联系, 所以热力学第二定律从统计的观点可以理解为, 一个孤立系统内部发生的任何过程, 总是从概率小的状态向概率大的状态进行, 总是从包含微观状态数目少的宏观态向包含微观状态数目多的宏观态进行。这样一来, 利用熵(entropy)的定义 $S = k_B \ln W$ (其中, W 是微观状态数目, k_B 是玻尔兹曼常量), 热力学第二定律又可以表述为, 在孤立系统中发生的一切实际过程, 总是使整个系统的熵值增加, 就是所谓熵增加原理(principle of entropy increase)。根据这个原理, 热力学第二定律可以表示为

$$S_{II} - S_I \geq \int_I^{II} \frac{dQ}{T} \quad (1.1.3)$$

式中, 不等号对应于不可逆过程; 等号对应于可逆过程; 下标 I 和 II 分别表示系统的初状态和末状态; T 和 S 分别表示系统的温度和熵。

(3) 热力学第三定律的基本表述为: 绝对零度不可能达到(即不可能通过有限个步骤使物体冷却到绝对零度)。而化学热力学中普遍采用的表述为: 在绝对零度时任何纯物质的完整晶体的熵等于零。这里所谓完整晶体是指晶体中的原子或分子都只有一种排列形式。热力学第三定律的内容与熵的概念是一致的。在绝对零度时, 纯物质的完整晶体中, 所有的微粒都处于理想的晶格结点位置上, 没有任何热运动, 是一种理想的完全有序状态, 所以其熵值为零。这个定律在数学上可表示为

$$\lim_{T \rightarrow 0} S = 0 \quad (1.1.4)$$

热力学理论中最具学术意义和应用价值的结果之一是范德瓦耳斯方程(van der Waals equation)

$$\left(P + \frac{a}{V^2}\right)(V - b) = RT \quad (1.1.5)$$