高等量子力学导论

井孝功 张井波 编著

哈尔滨工业大学出版社

内 容 简 介

本书是在现有高等量子力学教学大纲界定的范围之内编写的，以解决教学之急需。内容包括：量子力学纲要，量子力学的形式理论，近似方法中的递推与迭代，多体理论，对称性和守恒定律，量子散射理论，相对论量子力学和量子信息学基础等。在引入新的概念与理论之前，本书尽量对已学过的量子力学知识进行回顾和复习，由浅入深，循序渐进。为保证内容的先进性，增加了诸如量子信息学等当今热点内容。

本书是物理系各专业研究生学位课教材，也是相关专业科技人员的参考书。

图书在版编目(CIP)数据

高等量子力学导论./井孝功，张井波编著.—哈尔滨：哈尔滨工业大学出版社，2004.6

ISBN 7-5603-2003-1

Ⅰ.高… Ⅱ.井… Ⅲ.量子力学-高等学校-教材 Ⅳ.O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 010198 号

出版发行 哈尔滨工业大学出版社
社　　址 哈尔滨市南岗区教化街 21 号　邮编 150006
传　　真 0451-86414749
印　　刷 肇东粮食印刷厂
开　　本 787×960　1/16　印张 16.5　字数 305 千字
版　　次 2004 年 6 月第 1 版　2004 年 6 月第 1 次印刷
书　　号 ISBN 7-5603-2003-1/O·164
印　　数 1～3 000
定　　价 23.00 元

前　言

自1978年国内恢复研究生招生制度以来，高等量子力学就被列为物理系各专业研究生必修的学位课程之一，同时高等量子力学也是报考博士研究生的考试科目之一。

高等量子力学之所以受到重视的原因是，量子理论是处理介观与微观问题的基础理论，它已经成为解决物理学乃至相关学科(生命、信息和材料)理论问题的关键。因此，高等量子力学的教学效果将直接影响到学生科研能力与论文的水平。基于上述原因，国内外重点大学都十分重视高等量子力学的教学工作，纷纷选派有经验的教师任教，组织人力编写适用的教材。

目前，从我校物理系硕士研究生的实际情况来看，有些学生在本科生期间，量子力学课程只有36学时，仅相当正常学时的一半。而现有的高等量子力学教材的起点都比较高，使学生接受起来十分困难，因此，急需编写一本比较适合学生实际需要的教材。

鉴于上述原因，在现有的高等量子力学教学大纲界定的范围之内，我们编写这本高等量子力学导论，以解一些学生的燃眉之急。

首先，书中注意到学生的量子力学基础知识参差不齐的实际情况，在第1章中，对量子力学的基本内容进行了总结与复习，在后面的章节中，在引入新的概念与理论之前，尽量对已经学过的量子力学知识进行回顾和复习，做到由浅入深和循序渐进。其次，高等量子力学是物理系各专业(例如，粒子物理与原子核物理、凝聚态物理和光学)的共同学位课，必须同时顾及各专业的需求。最后，为保证教学内容的先进性，增加了诸如量子信息学等当今热点内容。

本书正式出版之前，曾在两届硕士研究生中试用过，不少学生指出了其中的一些错误，提出了一些有益的建议，作者在此表示感谢。另外，哈尔滨工业大学应用物理系和张卫宁教授对本书的出版给予了积极的鼓励和支持，谨在此表示谢意。

量子理论是一门博大精深的学问，涉及的知识面实在是太广泛了，而且随着理论与实验的进步和发展，不断有新的内容出现。虽然我们长期从事量子理

论领域的教学和科研工作，但是所涉猎的内容毕竟还是有限，所以本书只能对高等量子力学起到入门的作用，这也是将其称为高等量子力学导论的缘故。由于我们的水平有限，加之时间仓促，一定有诸多不当之处，恳请读者批评指正。

井孝功　张井波
于哈尔滨工业大学
2004年元月

目　　录

第 1 章　量子力学纲要

1.1　量子力学概述

1.1.1　量子力学的诞生

1. 两个理论

相对论与量子论是 20 世纪的两个最重大的科学发现。

光速 c 和普朗克(Planck) 常数 h 分别是其标志性常数。

当 $v \ll c$ 时,相对论退化为牛顿(Newton) 力学。

当 $lp \gg h$ 时,量子论退化为牛顿力学。

式中,v 为粒子的运动速率,l 与 p 分别为粒子运动的范围与动量。

2. 三个实验

(1) 黑体辐射

维恩(Wien) 公式

$$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = c_1 \exp\left(-c_2 \frac{\nu}{T}\right)\nu^3 \mathrm{d}\nu$$

瑞利(Rayleigh) - 金斯(Jeans) 公式

$$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{8\pi kT}{c^3}\nu^2 \mathrm{d}\nu$$

普朗克公式

$$\rho_\nu \mathrm{d}\nu = \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{kT}\right)-1}\mathrm{d}\nu$$

普朗克的能量子假说　　$\varepsilon = h\nu$

式中,ν 为振子频率,ρ_ν 为能量密度,k 为玻耳兹曼常数,T 为温度,ε 为振子能量,c_1 与 c_2 为常数。

(2) 光电效应

爱因斯坦(Einstein) 的光量子假说　　$\varepsilon = h\nu$

由 $\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - W_0$ 可知,只有当光子的频率 ν 不小于阈值 $\nu_0 = \frac{W_0}{h}$ 时,才

有光电子的发射。式中，m 与 v 分别为电子的质量和运动速率，W_0 为脱出功，ε 为光子能量。

(3) 原子光谱

玻尔(Bohr)的旧量子论　原子在能量分别为 E_n 和 $E_m(E_n > E_m)$ 的两个定态之间跃迁时，发射或吸收的电磁辐射的频率 ν 满足如下的关系式

$$h\nu = E_n - E_m$$

光谱项为

$$T(n) = -\frac{E_n}{h}$$

3. 三个飞跃

(1) 普朗克量子假说

$$\varepsilon = h\nu, E_n = n\varepsilon \quad (n = 0,1,2,\cdots)$$

(2) 德布罗意(de Broglie)物质波假设

$$E = \hbar\omega; \quad \boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}$$

式中，$\hbar = \dfrac{h}{2\pi}$，$\omega = 2\pi\nu$ 为角频率，$\boldsymbol{k}$ 为波矢量，$\boldsymbol{p}$ 为动量。

(3) 薛定谔(Schrödinger)方程与玻恩(Born)概率波解释

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

式中 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 为描述体系状态的波函数，$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 表示 t 时刻在 $\boldsymbol{r}$ 附近单位体积元内发现粒子的概率，$\hat{H}$ 为哈密顿(Hamilton)算符。

4. 五个基本原理

(1) 波函数的概率波解释　体系的状态用波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 来描述，$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$ 表示 t 时刻在 $\boldsymbol{r}$ 附近单位体积元内发现粒子的概率。

(2) 状态叠加原理　若体系具有一系列可能状态 $\psi_1,\psi_2,\psi_3,\cdots,\psi_n$，则这些可能状态的任意线性组合

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 + \cdots + c_n\psi_n = \sum_{m=1}^{n} c_m\psi_m$$

也一定是该体系的一个可能的状态，其中，$c_1,c_2,c_3,\cdots,c_n$ 为任意复常数。

(3) 薛定谔方程　状态随时间的变化遵循薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

(4) 算符化规则　经典物理学中的力学量用线性厄米算符来代替，并且上述的替代关系是一一对应的。

(5) 全同性原理　在全同粒子体系中，交换任意两个粒子的坐标不改变体系的状态。

1.1.2　在物理学中的位置

1. 按照研究方法分类

理论物理;实验物理;计算物理。

2. 按照所研究对象的尺度分类

宏观物理;微观物理;介观物理。

量子力学属于理论物理范畴,主要应用于微观物理和介观物理领域。

1.1.3　基本内容、特色及应用前景

1. 基本内容

包括波函数、算符和薛定谔方程三个要素。

2. 特色

在力学量取值量子化、势垒隧穿及不确定关系等内容上与经典力学有本质的差别。

3. 应用前景

在 21 世纪,生命、材料与信息等重要领域的发展都离不开量子理论。

1.2　波函数

1.2.1　波函数的物理内涵

1. 波函数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ 是描述体系状态的复函数,满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

2. 波函数的表示

波函数可以在任意表象中写出来,例如,$\psi(\boldsymbol{r},t)$、$\Phi(\boldsymbol{p},t)$、$C_n(t)$ 分别表示坐标、动量和任意力学量 F 表象中的波函数,也可以用狄拉克(Dirac)符号来表示 $|\psi(t)\rangle$。

3. 波函数的模方表示其自变量的取值概率(密度)

例如,$|C_n(t)|^2$、$|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2$、$|\Phi(\boldsymbol{p},t)^2|$ 分别表示自变量 F、$\boldsymbol{r}$、$\boldsymbol{p}$ 的取值概率(密度)。

1.2.2　波函数应满足的条件

1. 波函数应该是平方可积的函数

$$\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(\boldsymbol{r},t)|^2\mathrm{d}\tau=\text{有限}$$

2. 自然条件

波函数还应该是单值、有限和连续的函数。

3. 边界条件

(1) 在位势的间断点 a 处,波函数及其一阶导数连续

$$\psi_1(a) = \psi_2(a); \quad \frac{\psi_1'(x)\,|_a}{m_1^*} = \frac{\psi_2'(x)\,|_a}{m_2^*}$$

式中,m_1^*、m_2^* 分别为粒子在第一和第二个区域中的有效质量。

当一个区域中的位势为无穷大时,只要求波函数连续,不要求波函数的一阶导数连续。

(2)δ 位势 $V(x) = \pm V_0 a\delta(x)$ 要求波函数连续,而波函数的一阶导数满足

$$\psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \pm \frac{2m}{\hbar^2} V_0 a\psi(0)$$

其中,a 具有长度量纲,V_0 具有能量量纲。

1.2.3 具有特殊性质的波函数

1. 本征态

定义　满足本征方程 $\hat{F}\,|\,n\rangle = f_n\,|\,n\rangle$ 的状态 $|\,n\rangle$ 称为 $\hat{F}$ 的本征态。

正交归一化条件　$\langle m\,|\,n\rangle = \delta_{mn}$

封闭关系　$\sum_n |\,n\rangle\langle n\,| = 1$

测量　在 $\hat{F}$ 的本征态 $|\,n\rangle$ 上,测量力学量 F 得其本征值 f_n。

2. 定态

定义　定态是能量取确定值的状态。

性质　定态之下不显含时间力学量的取值概率与平均值不随时间改变。

条件　哈密顿算符不显含时间;初始时刻的波函数为定态。

3. 束缚态与非束缚态

束缚态　在无穷远处为零的状态为束缚态,束缚态相应的本征值是断续的。

非束缚态　在无穷远处不为零的状态为非束缚态,非束缚态相应的本征值是连续的。

4. 简并态与非简并态

简并态　一个本征值对应一个以上不同的本征态时,称该本征值简并,所对应本征态称为简并态,简并态的个数为简并度。

非简并态　一个本征值对应一个本征态时,称为非简并态,非简并态的简并度为 1。

5. 正宇称态与负宇称态

正宇称态　将波函数中坐标变量改变符号，若得到的新波函数与原来的波函数相同，则称该波函数具有正宇称。

负宇称态　将波函数中坐标变量改变符号，若得到的新波函数与原来的波函数相差一个负号，则称该波函数具有负宇称。

6. 耦合波函数与非耦合波函数

以两个自旋为$\frac{\hbar}{2}$的粒子为例，$s_1 = s_2 = \frac{1}{2}$，总自旋量子数 $S = 0,1$

非耦合波函数为　$|++\rangle$, $|--\rangle$, $|+-\rangle$, $|-+\rangle$

耦合波函数为　$|00\rangle$, $|10\rangle$, $|11\rangle$, $|1\,-1\rangle$

耦合波函数与非耦合波函数的关系为

$$|11\rangle = |++\rangle$$

$$|1\,-1\rangle = |--\rangle$$

$$|10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle + |-+\rangle]$$

$$|00\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|+-\rangle - |-+\rangle]$$

其中，$|++\rangle = |+\rangle_1 |+\rangle_2$ 是两个粒子体系的一个非耦合波函数，$|\pm\rangle_k \equiv |\frac{1}{2}, \pm\frac{1}{2}\rangle_k$ 为第 $k(=1,2)$ 个粒子在 s^2、s_z 表象下的本征态。

7. 对称波函数与反对称波函数

反对称波函数　全同费米(Fermi)子体系用反对称波函数描述，对二体问题而言，有

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_1(x_2) \\ \varphi_2(x_1) & \varphi_2(x_2) \end{vmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) - \varphi_1(x_2)\varphi_2(x_1)]$$

对称波函数　全同玻色(Bose)子体系用对称波函数描述，对二体问题而言，有

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\varphi_1(x_1)\varphi_2(x_2) + \varphi_1(x_2)\varphi_2(x_1)]$$

1.2.4　状态叠加原理与展开假设

1. 状态叠加原理

若 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 为体系可能的状态，则 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + \cdots + c_n\psi_n$ 也是体系可能的状态，其中，$c_1, c_2, c_3, \cdots, c_n$ 为任意复常数。

2. 展开假设

若力学量算符 $\hat{F}$ 满足本征方程

$$\hat{F}\varphi_n = f_n\varphi_n$$

则任意的波函数 ψ 可以向 $\{\varphi_n\}$ 展开,即

$$\psi = \sum_n c_n\varphi_n$$

其中, $|c_n|^2$ 为力学量 F 在 ψ 状态上取 f_n 值的概率,因此可以把 $\{c_n\}$ 视为 F 表象下的波函数。

1.2.5 状态随时间变化

1. 薛定谔方程

状态随时间的变化满足薛定谔方程

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \hat{H}\psi(\boldsymbol{r},t)$$

2. 当 $\frac{\partial\hat{H}}{\partial t} = 0$ 时,薛定谔方程的解

$$\psi(\boldsymbol{r},t) = \sum_n c_n(0)\,|\,n\rangle\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t\right)$$

其中

$$\hat{H}\,|\,n\rangle = E_n\,|\,n\rangle$$

$$\psi(\boldsymbol{r},0) = \sum_n c_n(0)\,|\,n\rangle$$

1.3 算　　符

1.3.1 算符化规则

1. 线性厄米算符

可观测的力学量 F 与一个线性厄米算符 $\hat{F}$ 相对应。

2. 常用算符

动量算符　$\hat{\boldsymbol{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$

自旋 $\left(\frac{\hbar}{2}\right)$ 算符　$\hat{s}_x = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix};\hat{s}_y = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\\mathrm{i} & 0\end{pmatrix};\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$

泡利(Pauli)算符　$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix}0 & 1\\1 & 0\end{pmatrix};\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\\mathrm{i} & 0\end{pmatrix};\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix}1 & 0\\0 & -1\end{pmatrix}$

总自旋算符　$\hat{\boldsymbol{S}} = \hat{\boldsymbol{s}}_1 + \hat{\boldsymbol{s}}_2, S = s_1 + s_2, s_1 + s_2 - 1, \cdots, |s_1 - s_2|$

轨道角动量算符　$\hat{\boldsymbol{l}} = \boldsymbol{r}\times\hat{\boldsymbol{p}}, \hat{l}_x = y\hat{p}_z - z\hat{p}_y$