

應用量子力學

Theory and Applications of
Quntum Mechanics

原著者：Amnon Yariv

譯述者：江 進 福

科技圖書股份有限公司

應用量子力學

Theory and Applications of
Quntum Mechanics

原著者：Amnon Yariv

譯述者：江 進 福

原 序

過去十餘年來，作者在美國加州理工學院，目睹大學部與研究所的教育，已建立一個新方向，在應用物理方面，已創設應用物理與研究所學位以供選擇。

應用物理學生的訓練，是預備將其所學，用以解決工技問題，而非投身探究揭開自然界的奧秘。迄今為止，我們的應用物理研究生，大都受的是傳統大學物理教育，訓練偏重在原子散射理論、基本粒子、相對論等方面以反應該系的特長。這種安排，忽略原子與分子與光譜、輻射與物質的作用、晶體的電子性質等題材，而這些題材是新興應用學門，諸如雷射、光波通訊、半導體電子學等的骨幹，在新發展的通訊技術上，扮演重要角色。

過去作者在加州理工學院教大三應用物理的新講義，將其整理成爲本書，這課程除介紹量子力學外，也帶領學生對一般與重要應用上作進一步的考慮。

本書的兩大“實際”重點題材，是半導體電晶體與雷射。由於電子工業，包括電腦的基本元件，因此特別強調電晶體；而雷射則已在許多科技方面，例如：融合研究、原子分子光譜、光纖通訊等已引起革命性的衝擊。

一般學生，在讀完本課程之後，若緊接一年甚至兩年的正規量子力學，希望這樣提早介紹量子力學的應用，而學生選擇應用物理作爲他的事業，將安祥的成熟而帶來開花結果。

（作者的謝詞省略）。

應用量子力學

目 錄

原 序

第一章 何謂量子力學？

1.1	牛頓力學與古典電磁學.....	1
1.2	黑體輻射.....	3
1.3	固體熱量與光電效應.....	4
1.4	光子動量與 Compton 散射	6
1.5	粒子波動性.....	9
1.6	氫原子與 Bohr 模型	11
1.7	習 題.....	15

第二章 算 符

2.1	算符的數學性質.....	17
2.2	算符的特徵函數與特徵值.....	18
2.3	Hermitian 算符.....	20
2.4	Hermitian 算符的特徵函數的正交性	21
2.5	特徵函數的歸一化.....	22
2.6	特徵函數的完備性.....	22
2.7	Dirac 記憶.....	23
2.8	習 題.....	26

第三章 量子力學的基本假設

3.1	量子力學的基本假設.....	28
3.2	物理量的平均值.....	29

2 應用量子力學

3.3	量子力學算符的形式	30
3.4	動量與位置算符的對易關係、對易算符與其特徵函數	32
3.5	$\psi(\mathbf{r})$ 的意義	33
3.6	能量算符的特徵函數—Schrodinger 方程式	34
3.7	測不準原理	34
3.8	測不準原理用於電磁場	37
3.9	習題	40

第四章 一維能量特徵值問題

4.1	無限位能井	41
4.2	有限位能井	43
4.3	有限位能障	47
4.4	粒子穿透的物理說明	50
4.5	習題	52

第五章 簡諧振子

5.1	字稱性	53
5.2	簡諧振子	55
5.3	產生與消滅算符	63
5.4	習題	66

第六章 角動量的量子力學

6.1	角動量算符	68
6.2	$\hat{I}_z$ 的特徵函數與特徵值	71
6.3	角動量大小平方的特徵函數與特徵值	71
6.4	習題	80

第七章 球形對稱場內的粒子與氫原子

7.1	球形對稱場內的一顆粒子	81
7.2	氫原子	83

7.3	氫原子問題的核質量修正	90
7.4	混成波函數與分子鍵	97
7.5	習 題	98

第八章 相同粒子系統

8.1	兩電子系統	100
8.2	氮原子	103
8.3	習 題	108

第九章 量子力學的矩陣架構

9.1	矩陣的若干基本性質	109
9.2	方陣的轉換	111
9.3	矩陣的對角化	111
9.4	算符用矩陣表示法	112
9.5	算符示象的轉換	114
9.6	用矩陣法導出算符的特徵函數與特徵值	115
9.7	角動量算符的矩陣元素	116
9.8	自旋角動量	121
9.9	角動量相加	122
9.10	習 題	125

第十章 時變性 Schrodinger 方程式

10.1	$\psi(\mathbf{r}, t)$ 的統計學解釋	128
10.2	算符的期望值	129
10.3	習 題	131

第十一章 微擾理論

11.1	非時變性微擾理論	133
11.2	時變性微擾理論	137
11.3	密度矩陣架構	143

4 應用量子力學

11.4 習題	146
---------	-----

第十二章 電磁輻射與原子系統間的作用

12.1 電磁學基本知識	147
12.2 電磁模式的量子化	150
12.3 黑體輻射	154
12.4 碰撞顯著的原子系統的誘發躍遷	158
12.5 自發躍遷	161
12.6 自發躍遷率 A 的量子力學推導	163
12.7 習題	168

第十三章 在原子性介質內輻射的吸收與色散

13.1 無碰撞二階原子系統的時變形態	171
13.2 原子系統的吸收與放大—碰撞顯著區	176
13.3 電極化、電導率與介電常數	178
13.4 原子極化率的密度矩陣推導	182
13.5 習題	190

第十四章 雷射振盪

14.1 雷射振盪	191
14.2 習題	201

第十五章 量子統計學

15.1 三種量子粒子	202
15.2 量子系統的計數法	205
15.3 Maxwell-Boltzmann, Fermi-Dirac 與 Bose-Einstein 統計法	208
15.4 多於一種成分的系統	212
15.5 分佈律中參數 β 的決定	213
15.6 習題	217

第十六章 統計分佈律的若干應用

16.1	Maxwell-Boltzmann 分佈	218
16.2	Fermi-Dirac 分佈	219
16.3	Bose-Einstein 分佈	224
16.4	習 題	225

第十七章 晶體內電子的能帶理論

17.1	Kronig-Penney 模型	226
17.2	多電子晶體	236
17.3	電子在晶體內的運動	239
17.4	由雜質控制的半導體導電性	242
17.5	習 題	245

第十八章 電子、核與磁場間的交互作用、 磁共振、雷射

18.1	軌道磁矩	247
18.2	自旋角動量	252
18.3	核自旋與核磁共振	254
18.4	超精細交互作用	257
18.5	電子順磁共振	263
18.6	習 題	269

第十九章 半導體內的電荷傳輸

19.1	內稟半導體內的載體	270
19.2	雜質原子的游離能	276
19.3	摻雜性半導體的載體濃度	279
19.4	電子在半導體晶體內的散射	283
19.5	擴散與重合	288
19.6	習 題	295

第二十章 $P-N$ 半導體接合， $P-N-P$ 接合電 晶體

20.1 $P-N$ 接合內的載體與位能圖.....	297
20.2 外加電壓的 $P-N$ 接合	301
20.3 $P-N-P$ 接合電晶體	308
20.4 習 題	316

第二十一章 半導體注入雷射

21.1 半導體內的光吸收與激發放射.....	318
21.2 習 題	330

參考資料

第一章 何謂量子力學？

在十九世紀末到二十世紀初，愈來愈多的現象被發現不宜或不能用過去的物理定律來解釋，物理科學顯然需要重大修定，尤其是解釋包含微小粒子的；例如：原子、電子以及與電磁場交互作用等現象，困擾特別多。

起先，這些缺陷是用假設、公設來彌補，隨着缺陷數目增加，物理學需要重新構築，尤其是微小系統的物理學始能清楚，這一發展的結果，就是量子力學（quantum mechanics），這是人類知識進步的成就之一。

在第一章裏，我們將陳述量子力學的發展以及古典物理結果相對比，詳述若干以往無法用古典物理解釋的現象。

1.1 牛頓力學與古典電磁學

[1] 牛頓力學（Newtonian mechanics）

在非相對論性物理（nonrelativistic physics）中，粒子受力則起運動。描述此運動的定律為

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt} \quad (1.1)$$

其中， m 為粒子質量， $\mathbf{F}$ 為力， $\mathbf{v}$ 是速度。對於較重粒子，例如礫石，此定律聯同重力定律，即可正確的預測其軌跡。牛頓力學的重要一面，便是它的決定性（determinism），只要在某一瞬間，粒子的位置與速度為已知，且作用力亦為已知，則在任何時刻的行為便可定出。

[2] 電磁性（Electromagnetism）

古典電磁學中，電場 $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ 與磁場 $\mathbf{B}(\mathbf{r}, t)$ 係用 Maxwell

2 應用量子力學

方程式描述。在真空中，其公制式爲¹

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (1.2a)$$

$$\nabla \times \mathbf{B} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (1.2b)$$

其中， c = 光速。利用向量公式 $\nabla \times (\nabla \times \mathbf{A}) = -\nabla^2 \mathbf{A} + \nabla (\nabla \cdot \mathbf{A})$ ，以及在真空中 $\nabla \cdot \mathbf{E} = 0$ 。從以上兩式可得

$$\nabla^2 \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0 \quad (1.3)$$

以及 $\mathbf{B}$ 的類似方程式。式 (1.3) 的一個解爲

$$\mathbf{E} = \text{Re}(\mathbf{E}_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}) \quad (1.4)$$

其中

$$k = \omega/c \quad (1.5)$$

場 (1.4)，描述一平面波沿 $\mathbf{k}$ 方向以速度 c 傳遞。靜止觀察者將發現，該場以頻率 $\nu = \omega / 2\pi$ 振動（頻率單位爲 $1 \text{ Hz} = 1 \text{ cycle / sec}$ ），其波長爲

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{c}{\nu} \quad (1.6)$$

因此，古典物理提供兩套公式來描述自然現象，其一爲應付質點的力學；第二是應付輻射波的電磁理論。這兩類不同的現象假定由 Lorentz 力方程式耦合

$$\mathbf{F} = e[\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}]$$

¹ $c^2 = (\mu_0 \epsilon_0)^{-1}$ ，其中 μ_0 與 ϵ_0 分別爲真空的磁導率與電導率

式中，力 $\mathbf{F}$ 以速度 $\mathbf{v}$ 運動的點電荷 e 作用在場 $\mathbf{E}$ ， $\mathbf{B}$ 下。

1.2 黑體輻射

十九世紀末，二十世紀初年，物理學上一個主要未解問題為黑體輻射 (black body radiation)。一個理想的“黑體”，是對任何波長都完全吸收的材料。許多普通材料，例如煤黑，在頗長的波長範圍內為良好吸收體。對在同溫度的任何黑體，熱力學的討論，顯示其發射的光譜密度 (W/m^2 每單位頻率) $I(\nu)$ 是相同的，實驗結果亦如是； $I(\nu)$ 的測定曲線如圖 1-1。強度，在某一頻率 ν_m 達到最大值，在 ν_m 的兩邊均趨於零。頻率 ν_m 聯同尖峯的高度，隨溫度上升而增加。

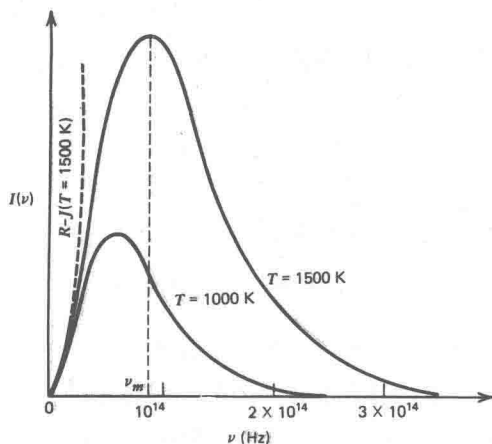


圖 1-1 黑體輻射光譜強度 $I(\nu)$ (單位頻率、單位面積的功率) 在 $T = 1,000 \text{ K}$ ， $T = 1,500 \text{ K}$ 的形狀。點線是由 Rayleigh-Jeans 式 (1.7) 繪出

黑體光譜強度 (spectral intensity) 的理論探討，在 1900 年以前都是失敗的。統計熱力學、古典力學、電磁學的使用，將得到所謂 Rayleigh-Jeans 公式

4 應用量子力學

$$I(\nu) = \frac{2\pi}{c^2} kT\nu^2 \quad (1.7)$$

式中， $k = 1.3807 \times 10^{-23} \text{ J/k}$ ，為 Boltzmann 常數。如圖 1-1 中，除在低頻部分外，均與實驗結果完全不符。將 Rayleigh-Jeans 定律預測光譜強度，對整個頻率範圍積分，得出無限大的輻射強度，但實際上應是有限的。

上述的矛盾，在 1900 年由 Max Planck² 用公設解決。他假設原子與輻射間交換的能量值是離散而非連續的。在頻率 ν 時，可交換的最小能量單位為

$$\epsilon = h\nu \quad (1.8)$$

其中， h 為常數，只有 $h\nu$ 的整倍數才可出現在作用中。利用此公設於黑體輻射理論中，Planck 獲得

$$I(\nu) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1.9)$$

其結果與觀測的十分契合，其 h 值為

$$h = 6.62377 \times 10^{-34} \text{ joule-sec}$$

這是最近的測定值。一般稱為 Planck 常數。

場能量是量子化而非連續的，是一新鮮而奇妙的物理觀念。在某些情況，波動現象最好用粒子為項來描述—光子 (photons)—，其運動速率為 c ，能量為 $h\nu$ 。

1.3 固體熱量與光電效應

另一不能用一般物理來解釋的現象是固體熱量 (heat capacity)

²M. Planck, *Ann. Phys.* 4, 553 (1901)

C 。實驗結果如圖 1-2，在低溫下， $C \propto T^3$ ，較高溫時 C 趨於一常數值。普通的統計熱力學 (statistical thermodynamics)，視晶體內每一原子為一振子，每一自由度的平均熱能為 $kT/2$ ，於是每單位體積能量為

$$\mathcal{E} = 3NkT$$

其中， N 為密度 (atoms/m³)。於是熱量 $C_v = \partial \mathcal{E} / \partial T$ 為

$$C = 3Nk \quad (1.10)$$

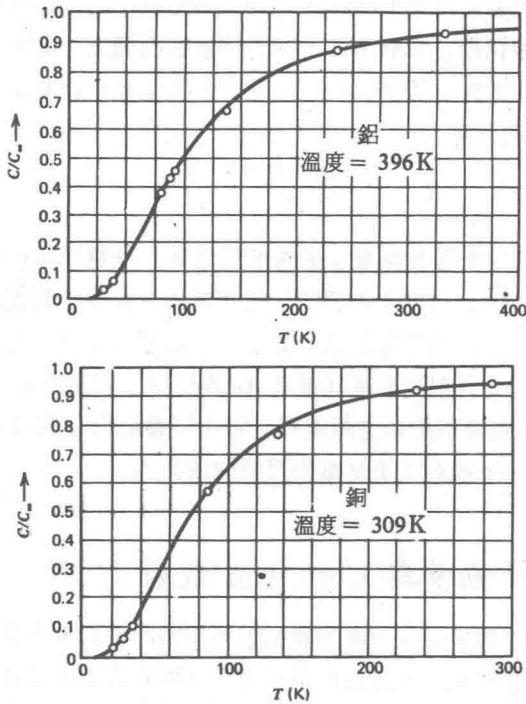


圖 1-2 鋁與銅的比熱觀測值 (圈點) 以及 Debye 模型理論結果

6 應用量子力學

與溫度無關。這個問題為 Einstein³ 與 Debye⁴ 氏所解決，他們將量子化條件式 (1.8) 用到晶體的機械振動。Planck 公式應用到振子，最深奧的結果是平均熱能不再是 kT (古典結果)，而是

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (1.11)$$

注意： $kT \gg h\nu$ 時 $\bar{\epsilon} \rightarrow kT$ ，式 (1.11) 用到熱量問題，其結果與實驗相當符合，如圖 1-2 所示。

[1] 光電效應 (the photoelectric effect)

電磁場能量量子化 (energy quantization) 的一個直接肯定，由光電發射現象供給。當頻率為 ν 的光照射在固體上，設 ϕ 代表材料及其表面性質的常數。若 $h\nu > \phi$ ，則電子將從固體表面射出，若射出電子的動能為 T ，則

$$h\nu = \phi + T$$

這個現象與入射光強度無關。光強度只決定每秒電子發射的數目。此解釋由 Einstein 於 1905 年提出，應用電磁場粒子，即光子，各攜的能量為 $h\nu$ 。阻止電子從材料脫離至真空的能障 (energy barrier) 的高度為 ϕ ，若入射光子將其能量 $h\nu$ 傳給靠近表面的電子。假如 $h\nu < \phi$ ，此能量不足以克服能障，電子不會射出。假如 $h\nu > \phi$ ，則超額 $T = h\nu - \phi$ 成為電子脫離表面時的能量。

1.4 光子動量與 Compton 散射

Planck 假設，在解釋黑體輻射與固體熱量的重大成功，提示我們，也許將電磁輻射設想由粒子 (光子) 所組成，光子能量為 $\hbar\omega$ ($\hbar\nu = \hbar\omega$)⁵。輻射的粒子性 (particle nature) 更由光電效應所證實

³A. Einstein, *Ann. Phys.* 22, 180 (1907)

⁴P. Debye, *Ann. Phys.* 39, 789 (1912)

⁵常數 $\hbar \equiv h/2\pi$ ，常被使用

，自然的會解答我們疑惑光子除能量外，是否具有動量？古典（相對論性）力學中，質點能量 E 與動量 p 間的關係為

$$\mathcal{E} = (p^2 c^2 + m^2 c^4)^{1/2} = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - (v^2/c^2)}} \quad (1.12)$$

其中， m 為靜止質量， c 為光在真空中的速度， v 為質點速度。如將式 (1.12) 應用到光子，則 $v = c$ ，因其能量為有限值，($\mathcal{E} = h\nu$)，靜止質量應為零。遂有

$$\mathcal{E} = pc \quad (1.13)$$

利用 $\mathcal{E} = \hbar\nu$ 與 $\omega = kc$ ，則

$$p = \frac{\mathcal{E}}{c} = \hbar k = \frac{h}{\lambda} = \frac{h\nu}{c} \quad (1.14)$$

波的表示式 (1.4)

$$E = E_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}$$

可用光子能量與動量寫成

$$E = E_0 e^{-i(\mathcal{E}t - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})/\hbar} \quad (1.15)$$

這樣將質點動量 p 與電磁場載體，即光子，相連起來，自然需用實驗來證實。最直接而清楚的光子動量說明，來自短波輻射（一般為 x -射線）被電子散射—Compton 散射。

設在 Compton 散射中，輻射的波長為 λ_1 ($\lambda_1 = c/\nu_1$)，照射在一些電子上，經散射後，在與入射方向夾角為 θ 的方向。由光譜儀測得的波長為 λ_2 ，電子原先為靜止，光子能量為 $p_1 c$ ，而 p_1 為原動量，如圖 1-3 所示。

設散射後電子動量為 $\mathbf{p}_e$ ，散射前後總能量守恒（電子加光子），即

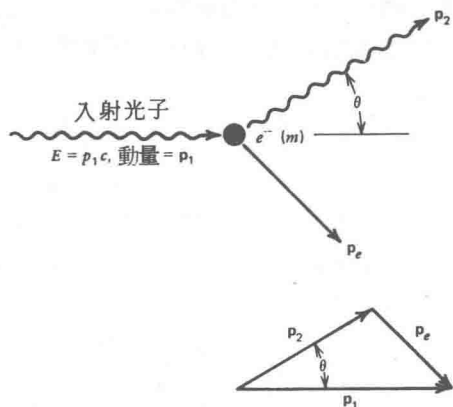


圖 1-3 電磁波與電子的 Compton 散射

$$p_1 c + mc^2 = p_2 c + (p_e^2 + m^2 c^2)^{1/2} c \quad (1.16)$$

而動量守恒式爲

$$\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_e + \mathbf{p}_2 \quad (1.17)$$

上式又可寫成餘弦定律爲

$$p_e^2 = p_1^2 + p_2^2 - 2p_1 p_2 \cos \theta$$

從上式與式 (1.16)，可得

$$\left(\frac{1}{p_2} - \frac{1}{p_1} \right) mc = 2 \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

光子動量與波長關係爲 $p = h/\lambda$ 。上式可改寫成

$$\lambda_2 - \lambda_1 = \frac{4\pi\hbar}{mc} \sin^2 \frac{\theta}{2} = 4\pi\lambda_e \sin^2 \frac{\theta}{2} \quad (1.18)$$

式中，電子的 Compton 波長被定義爲