"十二五"普通高等教育本科国家级规划教材
中国科学技术大学国家基础科学人才培养基地物理学丛书

主 编 杨国桢　副主编 程福臻

原子物理与量子力学

[下册]

（第二版）

朱栋培　陈宏芳　石名俊　编著

科学出版社

“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材
中国科学技术大学国家基础科学人才培养基地物理学丛书
主　编　杨国桢　　副主编　程福臻

原子物理与量子力学(下册)

(第二版)

朱栋培　陈宏芳　石名俊　编著

科学出版社
北　京

内 容 简 介

本书根据普通物理与理论物理的内在联系和各自特点，将原子物理和量子力学两部分内容放在一个统一的框架下统筹安排，从理论与实际的结合上讲述科学规律的发现、归纳与应用的整个过程，加强整体性和系统性，避免不必要的重复.

本书分上、下两册. 下册内容包括外场中的原子、多体问题、分子结构和能谱、散射、量子测量、量子态的非定域性和量子关联.

本书可作为普通高等院校物理或应用物理专业本科生学习原子物理学的教材，也可供相关专业的师生参考使用.

图书在版编目(CIP)数据

原子物理与量子力学. 下册/朱栋培，陈宏芳，石名俊编著. —2 版. —北京：科学出版社，2015. 3

(中国科学技术大学国家基础科学人才培养基地物理学丛书/杨国桢主编)

“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

ISBN 978-7-03-043839-3

Ⅰ. ①原…　Ⅱ. ①朱…②陈…③石…　Ⅲ. ①原子物理学-高等学校-教材②量子力学-高等学校-教材　Ⅳ. ①O562 ②O413. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 054686 号

责任编辑：窦京涛　王　刚 / 责任校对：张凤琴

责任印制：徐晓晨 / 封面设计：迷底书装

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

北京教图印刷有限公司印刷

科学出版社发行　各地新华书店经销

*

2008 年 7 月第　一　版　开本：787×1092 1/16

2015 年 6 月第　二　版　印张：20 7/8

2015 年 6 月第四次印刷　字数：423 000

定价：42.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

第二版丛书序

2008 年这套丛书正式出版，至今使用已五年，回想当初编书动机，有一点值得一提．我初到中国科学技术大学理学院担任院长，一次拜访吴杭生先生，向他问起科大的特点在哪里，他回答在于它的本科教学，数理基础课教得认真，学生学得努力，特别体现在十年 CUSPEA 考试（中美联合招收赴美攻读物理博士生考试）中，科大学生表现突出．接着谈起一所大学对社会最重要的贡献是什么，他认为是培养出优秀的学生，当前特别是培养出优秀的本科生．这次交谈给了我很深的印象和启示．后来一些参加过 CUSPEA 教学的老教师向我提出，编一套科大物理类本科生物理教材，我便欣然同意，并且在大家一致的请求下担任了主编．我的期望是，通过编写这套丛书将 CUSPEA 教学的一些成果能保留下来，进而发扬光大．

应该说这套书是在十年 CUSPEA 班的教学内容与经验基础上发展出来的，它所涵盖的内容有相当的深度与广度，系统性与科学的严谨性突出；另外，注重了普通物理与理论物理的关联与融合、各本书物理内容的相互呼应．但是，使用了五年后，经过教师的教学实践、与学生的互动，发现了一些不尽如人意的地方和错误，这次能纳入"'十二五'普通高等教育本科国家级规划教材"是个很好的修改机会，同时大家也同意出版配套的习题解答，也许更便于校内外的教师选用．为大学本科生教学做一点贡献是我们的责任，也是我们的荣幸．盼望更多的使用本套书的老师和同学提出宝贵建议．

杨国桢

2013 年 10 月于合肥

第一版丛书序

2008年是中国科学技术大学建校五十周年.值此筹备校庆之际,由几位长年从事基础物理教学的老师建议,编著一套理科基础物理教程,向校庆五十周年献礼.这一建议在理学院很快达成了共识,并受到学校的高度重视和大力支持.随后,理学院立即组织了在理科基础物理教学方面有丰富教学经验的老师,组成了老、中、青相结合的班子,着手编著这套丛书,并以此进一步推动理科基础物理的教学改革与创新.

中国科学技术大学在老一辈物理学家、教育家吴有训先生、严济慈先生、钱临照先生、赵忠尧先生、施汝为先生的亲自带领和指导下,一贯重视基础物理教学,历经五十年如一日的坚持,现已形成良好的教学传统.特别是严济慈和钱临照两位先生在世时身体力行,多年讲授本科生的力学、理论力学、电磁学、电动力学等基础课.他们以渊博的学识、精湛的讲课艺术、高尚的师德,带领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.这套丛书的作者,应该说都直接或间接受到过两位先生的教诲.出版这套丛书也是表达作者对先生的深深感激和最好纪念.

这套丛书共九本:《力学与理论力学(上、下)》、《电磁学与电动力学(上、下)》、《光学》、《原子物理与量子力学(上、下)》、《热学　热力学与统计物理(上、下)》.每本约40万字,主要是为物理学相关专业本科生编写的,也可供工科专业物理教师参考.每本书的教学学时约为72学时.可以认为,这套丛书系列不仅是普通物理与理论物理横向关联、纵向自洽的基础物理教程,同时更加适合我校理科人才培养的教学安排,并充分考虑了与数学教学的相互配合.因此,在教材的设置上,《力学与理论力学(上、下)》、《电磁学与电动力学(上、下)》中,上册部分分别是普通物理内容,而下册部分为理论物理内容.还要指出的是,在《原子物理与量子力学(上、下)》、《热学　热力学与统计物理(上、下)》中,考虑到普通物理与理论物理内容的界限已不再那样泾渭分明,而比较直接地用现代的、实用的概念、物理图像和理论来阐述,这确实不失为是一种有意义的尝试.

这套丛书在编著过程中,不仅广泛吸取了校内老师的经验,采纳了学生的意见,而且还征求了中国科学院许多相关专家的意见和建议,体现了"所系结合"的特点.同时,还聘请了兄弟院校及校内有丰富教学经验的教授进行双重审稿,期望将其错误概率降至最低.

历经几年，在科学出版社大力支持下，这套丛书终于面世，愿她能在理科教学改革与创新中起到一点作用，成为引玉之砖，共同来促进物理学教学水平的提高及其优秀人才的培养，并望广大师生及有关专家们继续提出宝贵意见和建议，以便改进. 最后，对方方面面为这套丛书编著与出版的完成所付出艰辛努力及其给予关心、帮助的同志表示深切感谢！

中国科学技术大学理学院院长

杨国桢 院士

2007年10月

第二版前言

本书在 2008 年出版后，除中国科学技术大学外，一些兄弟院校也在教学中使用，反馈了很好的意见。

现在再版，除了改正编排等方面的错漏外，主要有两处大的变动。

测量是量子物理中非常基础、内容丰富而又充满疑猜的部分。本版专门加写了这方面的内容，作为第 10 章"量子测量"。

对原来的"量子态的非定域性和纠缠特性"作了改写和更新，按内容顺序变为第 11 章，题目也改为"量子态的非定域性和量子关联"。

虽然在实际教学中不断发现一些错漏并做了改正，但书中不当之处依然会存在，恳请读者继续指正。

编　者

2014 年 1 月

第一版前言

本书的基础是作者在中国科学技术大学讲授原子物理和量子力学两门课程的讲义.

原子物理和量子力学是普通高校物理专业学生必修的两门基础课,分属普通物理和理论物理,过去都是分开教学.这两门课实际是实验与理论、基础与提高的关系.本书根据普通物理与理论物理的内在联系和各自特点,将这两门课有机地贯通在一起讲授,加强整体性和系统性,避免不必要的重复,提高教学质量.

本书包括原子物理(近代物理)与量子力学的内容,现在是放在一个统一的框架下,授课教师可统筹安排,从理论与实际的结合上讲清科学规律的发现、归纳与应用的整个过程.这样的安排可能更加符合科学的历史和实际.

本书一般需要讲两个学期.对于只需了解原子物理、近代物理基础和量子力学基本框架的学生,只需学习上册就可以了.而对于需要学习上、下两册的学生,在教学安排上,可以把上册的第5章(原子核、粒子和宇宙演化)安排在最后讲.

现在这种写法,只是我们的一种尝试,不当之处在所难免,恳请读者提出批评和建议.

编　者

2007年8月

目　　录

第 6 章　外场中的原子

6.1　定态微扰论

研究量子体系的行为，在很大程度上和很多情形下就是求解薛定谔方程. 而薛定谔方程是一个二阶偏微分方程，势能的形式也多种多样，所以可以精确求解的具体问题是很少的. 虽然日益发展的计算机技术可以帮助人们得到很好的数值解，但是仍然有必要了解在具体的物理物理问题中寻求近似解的方法.

对于量子体系的哈密顿量不含时的情形，若精确解难以求得，近似方法之一即是我们首先将要讨论的定态微扰论.

6.1.1　非简并情形

考虑一个与时间无关的哈密顿量 $\hat{H}$，如果我们可以把它写成如下形式：

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}' \tag{6.1.1}$$

虽然在很多情形下 $\hat{H}_0$ 确实可以理解为另外某个哈密顿量，但是这种看法并不是必须的. 我们所希望的或所要求的，只是力学量 $\hat{H}_0$ 的本征方程，即

$$\hat{H}_0 \mid n^{(0)} \rangle = E_n^{(0)} \mid n^{(0)} \rangle \tag{6.1.2}$$

易于求解. 这里的 n 泛指描述量子体系的量子数，它可以是一个数，如能级的标记；也可以是若干个数，如包括角动量量子数以及角动量的 z 分量的量子数. 在目前讨论的非简并情形中，本征态和本征值是一一对应的. 另外，为了易于计算和讨论，假设 $\hat{H}_0$ 的能级是离散的.

我们面临的问题就是，利用易于求解的(6.1.2)式以及它已知的解，获得由(6.1.1)式表示的哈密顿量的本征值及本征态的近似解，即寻求如下本征方程的近似解：

$$(\hat{H}_0 + \hat{H}') \mid n\rangle = E_n \mid n\rangle \tag{6.1.3}$$

$\hat{H}'$被视作对于 $\hat{H}_0$ 的扰动，称为微扰项. 有如此说法则意味着相比于 $\hat{H}_0$ 而言，$\hat{H}'$是“很小”的，然而这二者都是算子，言其大小是很不严谨的，在下面的讨论中将给出 $\hat{H}'$被当成“微”扰项的条件.

(6.1.2)式的解已然知晓，方程(6.1.3)则是希望求解的. 暂且考察如下形式的本征方程：

$$(\hat{H}_0+\lambda\hat{H}')\mid n\rangle=E_n\mid n\rangle \tag{6.1.4}$$

其中的实参数 λ 连续地从 0 变化到 1. $\lambda=0$ 对应于(6.1.2)式, $\lambda=1$ 对应于(6.1.3)式. 引入参数 λ 意味着可以“控制”微扰项 $\hat{H}'$ 对于量子系统的影响程度.

在详细阐述之前,我们通过下面的例子说明参数 λ 的作用和意义.

两能级体系 设某个量子系统有哈密顿量

$$\hat{H}=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & \lambda H'_{12}\\ \lambda H'_{21} & E_2^{(0)}\end{pmatrix}$$

设 H'_{12} 和 H'_{21} 都是实数,而 $\hat{H}$ 是厄米的,故 $H'_{12}=H'_{21}$. 该哈密顿量的本征方程易解,其本征值为

$$\left.\begin{matrix}E_1\\ E_2\end{matrix}\right\}=\frac{E_1^{(0)}+E_2^{(0)}}{2}\pm\left[\frac{(E_1^{(0)}-E_2^{(0)})^2}{4}+\lambda^2H'^2_{12}\right]^{1/2}$$

设想 $\hat{H}=\hat{H}_0+\lambda\hat{H}'$,而

$$\hat{H}_0=\begin{pmatrix}E_1^{(0)} & 0\\ 0 & E_2^{(0)}\end{pmatrix},\quad \lambda\hat{H}'=\lambda\begin{pmatrix}0 & H'_{12}\\ H'_{21} & 0\end{pmatrix}$$

将 $\lambda\hat{H}'$ 当作微扰项,依据近似的观点,本征值 E_1 和 E_2 可以按照 λ 的幂次展开. 当 $\lambda|H'_{12}|\ll|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}|$ 时,有

$$\begin{aligned}E_1&=E_1^{(0)}+\frac{\lambda^2H'^2_{12}}{E_1^{(0)}-E_2^{(0)}}+\cdots\\ E_2&=E_2^{(0)}+\frac{\lambda^2H'^2_{12}}{E_2^{(0)}-E_1^{(0)}}+\cdots\end{aligned} \tag{6.1.5}$$

可见参数 λ 可作为能量本征值的级数展开的一个标记,其幂次标志了展开项的阶数,也可说是表示了近似解的精确程度. 令 $\lambda=1$,便可得到关于哈密顿量 $\hat{H}_0+\hat{H}'$ 的本征值的级数展开. 而级数的收敛需有条件

$$|H'_{12}|\ll|E_1^{(0)}-E_2^{(0)}| \tag{6.1.6}$$

继续考察(6.1.4)式. 设其能量本征值可如上述示例中的(6.1.5)式那样作级数展开

$$E_n=E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}+\cdots \tag{6.1.7}$$

相应地,本征态也作类似的展开

$$\mid n\rangle=\mid n^{(0)}\rangle+\lambda\mid n^{(1)}\rangle+\lambda^2\mid n^{(2)}\rangle+\cdots \tag{6.1.8}$$

将(6.1.7)、(6.1.8)式代入(6.1.4)式,令方程两边 λ^k 的系数相等,有

λ^0 项:
$$(\hat{H}_0-E_n^{(0)})\mid n^{(0)}\rangle=0 \tag{6.1.9}$$

λ^1 项:
$$(\hat{H}_0-E_n^{(0)})\mid n^{(1)}\rangle=(E_n^{(1)}-\hat{H}')\mid n^{(0)}\rangle \tag{6.1.10}$$

λ^2 项：$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) | n^{(2)} \rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}') | n^{(1)} \rangle + E_n^{(2)} | n^{(0)} \rangle \tag{6.1.11}$$

……

λ^r 项：$$(\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) | n^{(r)} \rangle = (E_n^{(1)} - \hat{H}') | n^{(r-1)} \rangle + E_n^{(2)} | n^{(r-2)} \rangle + \cdots + E_n^{(r)} | n^{(0)} \rangle \tag{6.1.12}$$

(6.1.9)式描述的是系统未受扰动时的情形，也称为 0 级近似，所有的非简并的 $|n^{(0)}\rangle$构成了正交归一且完备的基. 因此，$|n\rangle$可以表示为

$$| n \rangle = \sum_{n'} | n'^{(0)} \rangle \langle n'^{(0)} | n \rangle \tag{6.1.13}$$

在继续求解更高级的近似之前，考虑态的归一化，即最终得到的$|n\rangle$需是归一的. 有多种使之归一的办法，这里选择如下设定：

$$\langle n^{(0)} | n \rangle = 1 \tag{6.1.14}$$

这一设定尚不足以保证$\langle n|n\rangle=1$，但是，$|n\rangle$的归一化可以在得到了它的某一阶近似展开的具体形式后进行. 引入(6.1.14)式主要是为了以后的推导更为简明.

注意到$|n\rangle$的展开(6.1.8)式，有

$$\langle n^{(0)} | n \rangle = \langle n^{(0)} | n^{(0)} \rangle + \lambda \langle n^{(0)} | n^{(1)} \rangle + \lambda^2 \langle n^{(0)} | n^{(2)} \rangle + \cdots = 1$$

上式对任意的 λ 均应成立，故有

$$\langle n^{(0)} | n^{(r)} \rangle = 0, \quad r > 0 \tag{6.1.15}$$

这表明态的高级修正项——即若干个$|n^{(r)}\rangle$($r>0$)——与 0 级项是正交的.

考虑(6.1.10)式，它对应于一级修正(或者说一级近似). $|n^{(1)}\rangle$可展开为

$$| n^{(1)} \rangle = \sum_{n' \neq n} a_{n'}^{(1)} | n'^{(0)} \rangle \tag{6.1.16}$$

(6.1.16)式右端的求和中不含有 $n'=n$ 这一项，这是由(6.1.15)式决定的. 将(6.1.16)式代入(6.1.10)式，有

$$\sum_{n' \neq n} a_{n'}^{(1)} \langle m^{(0)} | (\hat{H}_0 - E_n^{(0)}) | n'^{(0)} \rangle = \langle m^{(0)} | (E_n^{(1)} - \hat{H}') | n^{(0)} \rangle$$

注意到$\langle m^{(0)} | \hat{H}_0 = E_m^{(0)} \langle m^{(0)} |$，并且将矩阵元$\langle m^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle$简记为 H'_{mn}，有

$$(E_m^{(0)} - E_n^{(0)}) a_m^{(1)} = E_n^{(1)} \delta_{mn} - H'_{mn} \tag{6.1.17}$$

当 $m=n$ 时，得到能量本征值的一级修正

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | \hat{H}' | n^{(0)} \rangle = H'_{nn} \tag{6.1.18}$$

当 $m \neq n$ 时，得到系数 $a_m^{(1)}$

$$a_m^{(1)} = \frac{H'_{mn}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{6.1.19}$$