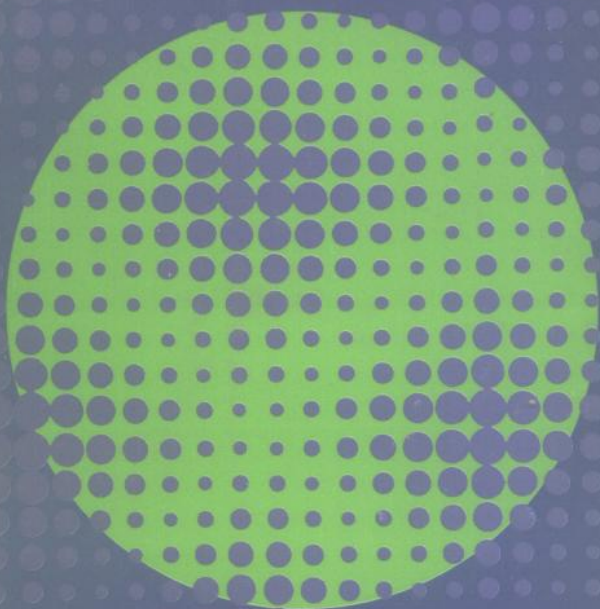


大连理工大学教授学术丛书

量子力学

LIANG ZI LI XUE

金百顺 刘作民 著



大连理工大学出版社

大连理工大学教授学术丛书

The Professors Academic Works Series
of the Dalian University of Technology

量子力学

金百顺 刘作民 著

大连理工大学出版社

(辽)新登字 16 号

图书在版编目(CIP)数据

量子力学/金百顺等著. —大连:大连理工大学出版社, 1994. 12

ISBN 7-5611-0972-5

I. 量… I. 金… II. 量子力学 N. O413. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(94)第 01679 号

大连理工大学出版社出版发行

(邮政编码: 116024)

大连海事大学印刷厂印刷

* * *

开本: 850×1168 1/32 印张: $12 \frac{1}{4}$ 字数: 310 千字

插页: 4

1994 年 12 月第 1 版 1994 年 12 月第 1 次印刷

印数: 0001—3000 册

* * *

责任编辑: 王启太 责任校对: 宋玉珠

封面设计: 孙宝福

* * *

ISBN 7-5611-0972-5

定价: 12.50 元

O · 130

本书由

**大连市学术专著资助出版评审委员会 资助
大连理工大学学术著作出版基金**

The book financed by

**the Dalian Evaluation Committee for
Publishing Academic Works Financed
and
the Publishing Academic Works Foundation
of the Dalian University of Technology**

序

《量子力学》无疑是物理系和有关的某些理工类专业的一门最重要、最困难的基础理论课程。所以说它最重要,是由于它是一系列新兴科学技术(如固体物理、原子核和基本粒子物理、量子化学和激光物理等)的理论基础。所以说它最困难,不仅是由于使用的数学工具比较高深,而且还由于描写微观粒子体系状态的波函数(一般为复函数)是不能直接被观测的,从而缺乏像古典物理那样的形象直观性。

在我们看来,量子力学课程在教学上的困难还由于一般教材的内容过多,并在基本原理的阐述上违反一定认识规律而加重。针对这些问题,本书在以下两个方面作出了努力:

1. 精简内容,强化基本理论干线,没有涉及诸如相对论性量子力学、二次量子化方法以及需要用群论表示的数学工具才能完全解决的像角动量的合成和某些对称性问题等比较高深和繁难的内容。

2. 在理论体系的阐述上,尽可能符合认识发展的规律,即按照从现象到本质,从特殊到一般,从具体到抽象的次序安排本书的内容;尽可能做到逻辑的和历史的统一,即扬弃历史表现的偶然性遵循思维本质的逻辑展开。在本书中,我们力图建立关于量子力学的带有“公理化”色彩的完整的物理理论体系。即通过四个基本原

理论述如何“利用前次测量的已知结果预断后次测量的结果”这一对微观体系的认识过程和所能获得的知识内容。具体地说,就是由本征函数与本征值的对应关系,通过对每一组完全集力学量的测量确定出体系所处的初始状态(认识从这里开始,以前的历史无法追溯),再由薛定谔方程确定出以后任意时刻的状态,从而可按叠加-概幅原理决定(预断)任意时刻对体系进行任意一个力学量的测量结果取各可能值的概率分布。

作者于大连理工大学

1994年7月

目 录

序

引言 从古典力学到量子力学的发展.....	1
0.1 普朗克量子假设	1
0.2 爱因斯坦的工作	2
0.3 玻尔—索墨菲古典量子论	4
0.4 波动力学的兴起	6
0.5 量子力学的建立	7
第一章 本征函数与本征值	10
1.1 本征函数与本征值	10
1.2 一维无限深势阱和一维 $\delta(x)$ 型势阱	14
1.3 厄米算符	19
1.4 本征函数的正交归一化	20
1.5 一维谐振子	23
1.6 带电粒子在均匀、恒定磁场中的运动	29
第二章 叠加-概幅原理	35
2.1 叠加-概幅原理, 本征函数系的完全性	35
2.2 平均值公式	44
2.3 不同力学量可以同时测量的条件	51
2.4 退化情况, 力学量的完全集合	55
2.5 轨道角动量	61
2.6 测不准关系及其例证	70

第三章 薛定谔方程	77
3.1 薛定谔方程, 动力学因果律, 守恒量, 定态	77
3.2 概率流密度, 连续性方程	89
3.3 量子力学体系的突变过程, 穆尔斯堡效应	92
3.4 量子力学体系的绝热(浸渐)过程	97
3.5 粒子对有限高度的阶形势壁的渗透和 矩形势垒的穿透	103
3.6 粒子在有心力场中的运动, 类氢原子	110
3.7 空间和时间的反演	119
3.8 力学量随时间的变化, 泊松括号	126
第四章 量子力学的古典极限与准古典(W. K. B)近似	130
4.1 爱伦菲斯特定理与向牛顿方程的过渡	130
4.2 薛定谔方程向古典力学中的 哈密尔顿—雅可俾方程的过渡	135
4.3 准古典(W. K. B)近似下的波函数	138
4.4 在分界点二侧, 准古典近似波函数的对接	142
4.5 粒子在一维势阱中的运动, 玻尔—索墨菲量子化规则	146
4.6 粒子对任意形状的势垒的穿透系数	148
第五章 表象理论	156
5.1 态的表象	156
5.2 表示力学量的算符的表象	159
5.3 矩 阵	166
5.4 量子力学公式的矩阵表述	169
5.5 一般角动量的理论	173
5.6 么正变换	182

第六章 微扰理论及其应用	191
6.1 定态微扰问题的一般论述, 不存在简并时的微扰理论	191
6.2 简并情况下的定态微扰理论和氢原子的 一级斯塔克效应	204
6.3 含时微扰理论	211
6.4 单色微扰, 费米黄金律	220
6.5 光的吸收和辐射	223
6.6 偶极跃迁的选择定则	229
6.7 氢原子的光电效应	231
第七章 散射理论	237
7.1 散射截面	237
7.2 弹性散射的精确理论方案, 分波法	240
7.3 低能粒子对势阱的散射	246
7.4 高能粒子散射的玻恩近似法	250
7.5 高能带电粒子对原子的弹性散射	254
7.6 高能电子对原子系统的非弹性散射	257
第八章 电子自旋的泡利理论	261
8.1 电子自旋的发现	261
8.2 自旋算符和自旋函数	263
8.3 考虑自旋后量子力学中方程、波函数的数学形式, 电子在电磁场中的运动方程和简单(正常)塞曼效应	270
8.4 自旋和轨道角动量的合成, 矢量模型	283
8.5 光谱的精细结构	291
8.6 在外磁场中的卤金属和类氢原子,	

复杂(反常)塞曼效应和帕邢—贝克效应	298
第九章 全同粒子系理论	311
9.1 微观粒子的全同性原理,对称态与反对称态, 玻色子与费米子	311
9.2 忽略粒子间相互作用的情形	314
9.3 忽略自旋-轨道耦合情形	316
9.4 量子多体效应,氦原子	323
9.5 变分法	329
附录	336
一、思想观点方面	336
(I)本质和现象的辩证法	336
(II)从古典力学到近代物理发展中的 几个认识论问题	340
二、物理表述方面	345
(III)量子力学中的狄拉克符号	345
(IV)谐振子的矩阵解法	351
三、数学工具方面	358
(V)厄米多项式	358
(VI)勒让德多项式	362
(VII)缔合勒让德函数	366
(VIII)拉盖尔多项式	371
(IX)平面波按球面波的展开	377
(X) $\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dk = \delta(x)$ 的证明	380

引言 从古典力学到量子力学的发展

古典力学中,宏观粒子运动的特征是在连续的时刻系列里通过连续的空间点列,形成“轨道”。描述这种运动状态的力学量——位置坐标和速度的取值域不受限制,并且前一时刻的取值唯一地决定后一时刻的取值,运动状态的变化遵从牛顿方程(或是他的高级形成)。其它力学量由位置坐标和速度决定,性质自然相同。

那么,微观粒子的运动形态又是怎样的呢?反映这种运动规律的理论——量子力学又是怎样建立起来的?为了回答这些问题,我们先简要地回顾一下它的发展史。

0.1 普朗克量子假设

热辐射的核心问题是黑体辐射能量密度按频率的分布。单位体积内频率在 $\nu \rightarrow \nu + d\nu$ 区间中的振子数为

$$dn(\nu) = \frac{8\pi\nu^2 d\nu}{c^3} \quad (0.1)$$

又根据经典统计力学中的能量均分原理,在温度 T 时,每个振子的平均能量

$$\bar{\epsilon} = KT \quad (0.2)$$

将(0.1)、(0.2)相结合,便得到:在温度 T 时,在频率区间 $\nu \rightarrow \nu + d\nu$ 的辐射能密度

$$\rho(\nu, T) d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} KT d\nu \quad (0.3)$$

这就是瑞利—琴斯公式。

瑞利—琴斯公式只在低频区域符合实验结果,在高频区域发

散,即发生所谓“紫外线灾难”。

为了克服理论和实验事实的矛盾,普朗克于1900年大胆地提出了量子假设。他认为,振子的能量只能取分立的数值

$$\epsilon_n = nh\nu, n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (0.4)$$

其中 h 称为普朗克常数

$$h = 6.62 \times 10^{-27} \text{ 尔格秒} \quad (0.5)$$

于是在温度 T 下,振子的平均能量

$$\bar{\epsilon} = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1} \quad (0.6)$$

将它和表式(0.1)相结合,便得到黑体辐射能量密度按频率分布的普朗克公式

$$\rho(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1} d\nu \quad (0.7)$$

这个公式完全符合实验结果。

反过来,如果把辐射能量密度按频率的分布规律(0.7)当做实验事实,则可以证明^①:振子的能量只能取分立值(0.4)。所以,振子能量的量子化可被看做已在实验上确证了的客观事实。但从古典物理看来,这个结论是太难于令人接受了,以致连普朗克本人也为了消除量子假设而徒劳地工作了十几年!

0.2 爱因斯坦的工作

和一般的人们相反,爱因斯坦认为要发展普朗克的量子假设。他的主要工作有:

一、固体比热理论

1 克原子固体晶格质点的振动可被看做 $3N_0$ (N_0 为阿佛加德罗常数)个谐振子的集合。根据经典统计力学的能量均分原理,在

^① 参见金百顺:《统计物理学导论》。

温度 T 下, 1 克原子固体的能量是

$$E = 3N_0KT = 3RT \quad (0.8)$$

这个公式符合固体比热的度隆——普梯定律。但实验发现: 固体的比热要随温度 T 的下降而趋于零。为了解释这个事实, 爱因斯坦假定: 晶格振子的能量也是量子化的, 只能取公式 (0.4) 表示的数值。因而在温度 T 下, 它的平均能量也按公式 (0.6) 表示。所以, 1 克原子固体在温度 T 下的能量是

$$E = 3N_0\bar{\epsilon} = \frac{3N_0h\nu}{e^{\frac{h\nu}{KT}} - 1} \quad (0.9)$$

按此, 固体的比热确随温度 T 的下降而趋于零。

但在爱因斯坦的工作中, 把晶格质点看作频率相同的独立谐振子。这显然是不妥当的, 因为晶格质点的振动之间存在着关联。这个问题后来由德拜等人所改正, 从而得到了较满意的固体比热理论。

二、光子假设

爱因斯坦认为: 不仅电磁波的能量只能取分立的值, 而且电磁波的动量也是这样, 即形成了所谓光子的概念。根据相对论, 粒子的动量-能量和电磁波的波矢 $\vec{K}$ -圆频率 ω 都构成四维矢量。所以爱因斯坦假定: 光子的四维动量 P_μ ($\mu=1, 2, 3, 4$) 和单色平面电磁波的四维波矢 K_μ 之间存在着下列关系:

$$P_\mu = \hbar K_\mu \quad (0.10)$$

其中

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.05 \times 10^{-27} \text{ 尔格秒} \quad (0.11)$$

称为新普朗克常数或狄拉克常数。写成三维形式, 即为

$$E = \hbar\omega, \quad \vec{P} = \hbar \vec{K} \quad (0.12)$$

这两个公式分别圆满地解释了光电效应和康普顿散射的实验事实, 而这两种效应用古典电磁波理论是无法理解的。

0.3 玻尔—索墨菲古典量子论

从卢瑟福进行 α 粒子散射的实验以后,就建立了原子的有核模型:电子绕原子核旋转,正如行星绕太阳旋转一样。问题是:

1. 稳定性 根据经典电动力学,作加速运动的电子要不断地辐射电磁波,因而电子的能量要不断地减少,最后必然要落到原子核上。这和原子的稳定性相矛盾。

2. 光谱 作加速运动的电子要发射出具有连续谱的光波。但在实验上观察到的却是一系列遵守所谓里兹组合原则的线光谱。例如氢原子,它的谱线遵守所谓巴尔曼系的经验公式:

$$\nu = RC \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad \begin{bmatrix} m = 1, 2, 3, \dots \\ n = 2, 3, 4, \dots \end{bmatrix} \quad (n > m) \quad (0.13)$$

其中 R 称为里德堡常数

$$R = 1.09 \times 10^5 \text{cm}^{-1} \quad (0.14)$$

所有这些都无法用经典物理学来理解。

为了克服这些矛盾,玻尔在 1913 年对最简单的氢原子提出了所谓古典量子论的模型。他假定:

1. 氢原子中的电子存在着一系列稳定的圆形轨道。在这些轨道上运动的电子不辐射也不吸收电磁波。

2. 当电子由一个稳定轨道(其能量为 E_n)跃迁到能量 E_m 较低的稳定轨道时,要辐射电磁波,其频率为

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} \quad (E_n > E_m) \quad (0.15)$$

这个公式称为玻尔的频率条件。

3. 电子在这些稳定的圆形轨道上运动的角动量遵守所谓量子化条件:

$$M = \mu r^2 \dot{\theta} = \frac{n\hbar}{2\pi} \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \quad (0.16)$$

根据量子化条件(0.16),玻尔得到稳定圆形轨道的能量

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (0.17)$$

即构成所谓能级。代入频率条件(0.15),便得到氢原子的光谱线系

$$\nu = \frac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (n > m) \quad (0.18)$$

这正是巴尔曼系公式(0.13)的形式。比较之,有

$$R = \frac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3 c} \quad (0.19)$$

这完全符合实际。

根据古典力学理论,电子在库伦力作用下绕原子核运动的轨道一般是椭圆,而不是圆。这一点玻尔当然是知道的。他之所以要假定圆形轨道,是因为他不知道在一般的椭圆情况下怎样来进行量子化,以确定可能的稳定轨道。索墨菲仔细地考虑了这个问题。他认为:所谓量子化条件就是要求某一力学量 W 只能取普朗克常数 h 整数倍的值

$$W = nh \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (0.20)$$

而原子可以而且经常处于变动着的宏观电磁场中。这种宏观场的变动过程比起电子绕核的运动来要缓慢得多。在力学上,它就是所谓的绝热过程。普朗克常数当然是一个不变的恒量,因而要求被量子化的量必须是一个在绝热过程中保持不变的量——绝热不变量。由古典力学理论,作用量积分就是这样的绝热不变量。^① 对于多自由度的周期系统,它们是

$$W_i = \oint P_i dq_i \quad (i = 1, 2, \dots, f) \quad (0.21)$$

其中 f 为周期系统的自由度。从而得到作为古典量子论基础的索墨菲量子化条件

^① 参见金百顺:《古典力学的现代教程》。

$$\oint P_i dq_i = n_i h \quad (i = 1, 2, \dots, f) \quad (0.22)$$

利用索墨菲量子化条件,不仅可以圆满地解释氢原子的光谱线系(包括光谱的精细结构——相对论效应),而且碱金属(Li, Na, K 等)原子的谱线问题以及光谱线在电场和磁场中的分裂等问题也得到了较好的解释。

但古典量子论在其发展中遇到了不可克服的原则性困难,主要有:

1. 无法解释光谱线的强度问题。
2. 不能解决稍复杂的量子体系问题。例如不能解释氦原子的谱线和氢分子的形成。

最后还有一个理论原则问题无法回答:为什么在古典力学允许的各种轨道中,只有符合量子化条件(0.22)的轨道才是可能的?

0.4 波动力学的兴起

在古典量子论遇到了不可克服的困难的情况下,德布洛意受光的波-粒二象性的启发于1924年大胆地提出了所谓物质波的假设。他是这样提出问题的:“如果说19世纪在对光的研究上,只重视波动性的一面,而忽略了光的微粒性,那末在对实物的研究上是否犯了相反的错误呢?即过份重视了实物的微粒性,而忽略了实物的波动性?”于是他仿效公式(0.12),假定:具有一定动量-能量的粒子联系着一定波矢-圆频率

$$\vec{P} = \hbar \vec{k}, \quad E = \hbar \omega \quad (0.23)$$

的单色平面波

$$\psi(\vec{r}, t) = ce^{i(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t)} = ce^{\frac{i}{\hbar}(\vec{P} \cdot \vec{r} - Et)} \quad (0.24)$$

关于微观粒子波-粒二象性的上述假定很快被晶体上电子、中子、原子等微观粒子的衍射实验所证实。

在微观粒子具有波动性的基础上,薛定谔通过与光学类比和

外插的方法导得了波函数满足的基本方程——薛定谔方程。但是在波函数 $\psi(\vec{r}, t)$ 意义的物理解释上波动力学遇到了严重的问题。首先认为波是由粒子构成的,如空气中的声波。但这与单个粒子也具有波动性的实验结果相矛盾。其次认为粒子是由波构成的。但根据公式(0.24)可以证明:即使开始定域在一个小区域中的波包也要扩展至整个空间。这与微观粒子的稳定结构相矛盾。最后当玻恩提出波函数的统计解释以后,人们认为:微观粒子的运动好像布朗运动, $|\psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r}$ 就代表粒子在时刻 t 处在 $\vec{r}$ 附近的体积元 $d\vec{r}$ 中的概率。但这种理解也难于和例如氢原子具有确定的能级相协调。

总之,他们对于波函数的理解没有跳出古典物理学的框框。

0.5 量子力学的建立

大家知道,近代量子力学是由哥本哈根学派建立起来的。他们是怎样考虑问题的呢?首先,

海森堡断言:微观粒子的波-粒二象性是和粒子的轨道概念不相容的,为了证明这点,他们引用了不少理想实验,其中最著名的是双缝衍射-干涉的理想实验。设有一单色平面波(0.24)射入如图0.1所示的实验装置。根据

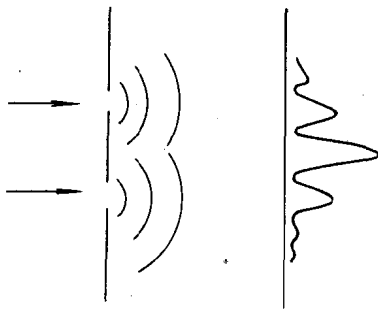


图 0.1 双缝衍射-干涉示意图

波动理论,在右边屏上将出现衍射-干涉图像。它和两个缝单独开放时出现的衍射图像的简单叠加是不同的,因为双缝之间还存在着干涉。这个现象怎样用微粒的图像来解释呢?如果粒子是从双缝之一进入的,则在屏上最多将出现两个单缝衍射图像的简单叠加。因为经过一个缝的粒子不可