

量子力学基础

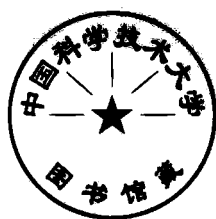
LIANGZILIXUEJICHU

曾锡滨 编著

北京师范大学出版社

量子力学基础

曾锡滨 编著



北京师范大学出版社

一九九五年七月

图书在版编目(CIP)数据

量子力学基础/曾锡滨编著. —北京:北京师范大学出版社, 1995. 7

ISBN 7-303-04069-2

I. 量… I. 曾… III. 量子力学 N. 0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(95)第 13711 号

量子力学基础

曾锡滨编著

北京师范大学出版社出版发行

(100875 北京新街口外大街 19 号)

湖南省国土测绘管理局衡阳印刷厂印刷

全 国 新 华 书 店 经 销

开本: 850×1168 1/32 印张: 8.75 字数: 228 千

1995 年 7 月第 1 版

1995 年 7 月第 1 次印刷

印数 1—2000 册

定价: 9.80 元

ISBN 7-303-04069-2/G · 2863

内 容 简 介

本书系统地阐述了非相对论量子力学的基本概念、原理和最常用的近似方法。全书共分五章：第一章着重讲述微观粒子的波动性和波函数概念；第二章薛定谔方程及简单应用；第三章力学量的算符表示理论；第四章微扰论和变分法；第五章电子的自旋和全同多粒子体系。内容简明扼要，物理概念明确，正文简化了数学处理，复杂的数学推导以附录的形式写出。标记“*”部分可供选用，课时伸缩性较大（48—60课时）。每章有明确要求，每节有思考题和习题，书末有习题解答，适宜自学。

本书可作为师范高等专科学校和教育学院物理专业量子力学教材，也可作为师范本科院校物理系非理论专业和本科函授的量子力学教材或参考书。

序

量子力学是微观世界的基本运动规律。量子理论和相对论都是 20 世纪初期诞生的,由此产生了近代物理学。量子力学和相对论被称为近代物理的两大支柱。

当人们刚刚进入 20 世纪时,M·普朗克提出了辐射的量子理论,从而发现了普朗克常数。这便是人们认识微观世界的开始。到 1926 年,量子力学的理论已经基本形成。人们掌握了微观世界的基本规律之后,立即运用这一规律去驾驭微观世界,不断创造出辉煌的成果。原子能、激光、半导体、计算机、超导体以及小到粒子物理大到天体宇宙的所有研究成果,无一不是在量子力学的基础上取得的。

如果说 19 世纪是经典物理的世纪,那么 20 世纪无疑是近代物理,特别是量子力学的世纪。如果没有量子理论,20 世纪的物质文明就不是现在这个样子了。

量子力学历来是一门重要的基础课。在大学的本科和专科,虽然和经典物理课相比,量子力学的时数不多,然而其重要性绝不在经典物理之下。

我们即将进入 21 世纪。为了迎接 21 世纪的到来,人们都在谈论知识更新和教学现代化问题。毫无疑问,量子力学课在 21 世纪会提到更加重要的地位上来。21 世纪的中学生无疑应该具备更多的现代物理知识。在大学中,无论本科或专科,量子力学课无疑会处于更加重要的地位。

本书是为师专的量子力学课所编写的教材。根据师专的特点,本书注重物理概念而不过分强调其数学方面,所需学时不多,适合当前师专和本科非理论专业的要求。

量子力学已是一门高度成熟的学科。在一学期的讲授中,应选取哪些内容,以及这些内容应该用怎样的讲法,多数均已形成定

局。一本好的教材主要在于在有限的篇幅内，深入浅出地把有关的基本概念和基本内容讲清楚，讲透彻。

曾锡滨同志在衡阳师专讲授量子力学多年，积累有丰富的教学经验和深厚的量子力学知识。本书是他多年经验的结晶，书中不乏他本人的教学风格和特色，是一本经过时间检验的适用的师专教材。

学习本书的读者将是 21 世纪第一批中学教师。他们将担负着培养 21 世纪首批中学生的使命，他们将在 21 世纪的讲坛上活跃几十年。现在学好量子力学课是他们胜任 21 世纪教师工作的一个很好的准备。谨祝各位读者学好这一门重要的现代物理课程，信心十足地跨入 21 世纪。

喀兴林

1995 年 4 月于北京师范大学

目 录

序

第一章 对微观粒子的认识	(1)
§ 1.1 光的粒子性	(1)
§ 1.2 微粒的波动性	(9)
§ 1.3 不确定关系	(18)
§ 1.4 波函数及其统计解释	(23)
§ 1.5 态叠加原理	(32)
第二章 薛定谔方程及其简单应用	(37)
§ 2.1 薛定谔方程	(37)
§ 2.2 定态 定态薛定谔方程	(43)
§ 2.3 方势阱	(47)
§ 2.4 谐振子	(55)
* § 2.5 方势垒贯穿	(64)
第三章 力学量的算符表示	(71)
§ 3.1 力学量的算符表示	(72)
§ 3.2 力学量算符的本征值和本征函数	(79)
§ 3.3 力学量测量结果的概率分布 平均值	(92)
§ 3.4 不同力学量同时有确定值的条件	(101)
* § 3.5 力学量平均值随时间的变化 守恒量	(112)
§ 3.6 氢原子	(119)
* § 3.7 量子力学的矩阵表示及表象变换	(128)
* § 3.8 狄喇克符号	(138)
第四章 微扰论和变分法	(143)
§ 4.1 无简并的定态微扰论	(143)
§ 4.2 有简并的定态微扰论	(150)
§ 4.3 含时微扰的基本理论	(157)
§ 4.4 光的吸收和发射	(163)
§ 4.5 变分原理及应用	(174)
第五章 自旋和全同多粒子体系	(180)

§ 5.1	电子的自旋.....	(180)
§ 5.2	两个角动量的耦合.....	(188)
§ 5.3	全同多粒子体系的交换对称性和波函数.....	(196)
§ 5.4	泡利原理 氮原子.....	(207)
* § 5.5	氢分子 共价键.....	(214)
结束语	——关于量子力学的解释	(219)
附 录		(227)
习题解答		(249)
常用物理常数表		(270)
量子力学一般参考书		(270)
后 记		(271)

第一章 对微观粒子的认识

19 世纪末、20 世纪初许多新的实验事实使经典物理学遇到了困难. 当时的几个主要困难是: 1、黑体辐射问题; 2、光电效应问题; 3、原子的线光谱和原子的稳定性问题. 正是这些困难, 推动人们突破经典物理思想的束缚, 提出了关于微观粒子的全新观点, 开创了量子物理的新纪元.

对微观粒子的认识, 经历了两个认识过程: 关于光的认识, 先认识它的波动性, 而后认识它的粒子性; 关于静止质量不为零的微观粒子的认识, 先认识它的粒子性, 而后在与光的理论相比较的基础上认识它的波动性. 就是说, 微观粒子具有波粒二象性. 这一章我们将从基本的实验事实出发, 揭示光的粒子性, 而后着重讨论微粒的波动性, 及如何理解、如何描述这一性质的问题.

通过本章的学习, 要求正确认识、理解微观粒子的波粒二象性; 着重领会普朗克量子假设和德布罗意假设; 理解波函数这个基本概念, 掌握不确定关系和态叠加原理这两个基本原理.

初学者对于波粒二象性往往感到难以理解, 主要是因为它与经典的“波”和“粒子”概念既相联系有相似之处, 但又有原则区别, 而经典概念又根深蒂固, 人们往往习惯于用旧的概念去认识新的现象. 所以在学习中必须注重实验事实, 充分揭露经典理论的困难, 反复领会新的假设, 促成观点转变.

§ 1.1 光的粒子性

从 1802 年著名的杨氏实验开始, 光的干涉和衍射等大量实验充分证实光是一种波动. 19 世纪中叶麦克斯韦电磁理论发表后, 又从理论上更进一步论述了光是一种电磁波, 并得到了大量实验

证明. 正当人们兴高采烈地庆祝光的电磁理论胜利成功的时候, 黑体辐射、光电效应等新的事实又揭示了把光当作波动的局限性.

一、黑体辐射 普朗克量子假设

大家知道, 任何物体都在进行热辐射. 19 世纪末, 人们就已认识到热辐射同光辐射本质一样, 都是电磁波. 对于外来的辐射, 物体有反射和吸收的作用. 如果一个物体能全部吸收投射到它上面的辐射而无反射, 这种物体称为绝对黑体(简称黑体). 它是一种理想化模型. 一个用不透明材料制成的开小口的空腔, 如图 1.1, 可以看作是黑体, 其开口可以看作是黑体表面. 因为入射到小口上的外来辐射, 在腔内进行多次反射后几乎被完全吸收, 而从小口穿出者可以忽略. 当腔壁单位面积在任意时间内所发射的辐射能量与它所吸收的辐射能相等时, 空腔与辐射达到平衡. 研究平衡时腔内辐射能密度按频率的分布是当时人们注视的基本问题.

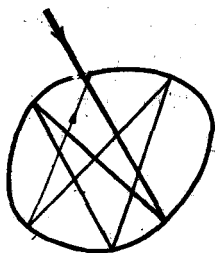


图 1.1

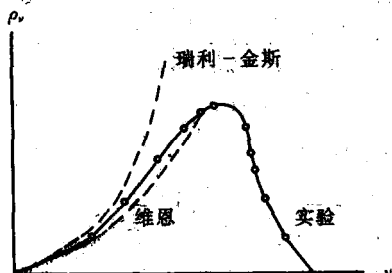


图 1.2

$\rho_\nu d\nu$ 表示腔内单位体积中频率在 $\nu - \nu + d\nu$ 间的辐射能量, 其中 ρ_ν 表示频率 ν 附近单位频率间隔内的辐射能密度. 实验得出 ρ_ν 按频率 ν 的分布曲线如图 1.2 所示, 其形状只与黑体的绝对温度 T 有关, 而与空腔的形状及组成无关.

上世纪末, 许多物理学家企图在经典物理学的基础上推导出

与实验相符合的能量密度公式,但都遭到了失败.其中最典型的要算维恩公式和瑞利-金斯公式.

维恩(Wien)基于平衡辐射能量密度按频率的分布与麦克斯韦速度分布律的相似,于1896年提出了一个公式:

$$\rho_\nu d\nu = c_1 \nu^3 e^{-c_2 \nu / T} d\nu \quad (1-1)$$

其中 c_1 和 c_2 是实验参数. 这个公式在高频部分与实验符合,但在低频部分显著不一致.

1900年,瑞利(Reyleigh)和金斯(Jeans)用经典电磁场理论和经典统计物理学中的能量按自由度均分原则处理热辐射问题,得到了另一个公式:

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT \nu^2 d\nu \quad (1-2)$$

其中 c 为光速, k 是玻耳兹曼常数. 此公式在低频部分与实验符合得较好,但 $\nu \rightarrow \infty$ 时, $\rho_\nu \rightarrow \infty$, 与实验明显不符. 物理学史上戏称为“紫外灾难”.

经典物理学在新的实验事实面前的困难,预示着新理论的诞生.

1900年,普朗克(Planck)在瑞利-金斯公式和维恩公式的基础上,进一步分析实验数据,得到了一个很好的经验公式:

$$\rho_\nu d\nu = \frac{c_1 \nu^3}{e^{c_2 \nu / T} - 1} d\nu \quad (1-3)$$

称为普朗克公式. 这个公式,当 $\nu \rightarrow \infty$ 时,趋于维恩公式(1-1),而当 $\nu \rightarrow 0$ 时,与瑞利-金斯公式(1-2)一致,其中 $c_1/c_2 = 8\pi k/c^3$.

这个公式发表后,许多人将它与最精确的实验数据核对,发现它以惊人的准确性与实验事实符合,这就促使普朗克去进一步寻找这个公式的理论证明. 在紧张地工作了大约8周以后,他成功地完成了这项工作. 1900年12月普朗克提出了上述公式的理论推导,并最后求得(1-3)式中的常数 $c_1 = \frac{8\pi h}{c^3}$, $c_2 = \frac{h}{k}$. 至此,(1-3)式便可表示成:

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1-3)'$$

式中 h 称为普朗克常数, $h = 6.626 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ 。

在推导时,普朗克作了如下假定:黑体是由带电的谐振子组成。对于频率为 ν 的谐振子,其能量只能是 $h\nu$ 的整数倍,即

$$E_n = nh\nu \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

当振子的状态发生变化时,只能以 $h\nu$ 为单位发射或吸收能量。能量 $\epsilon = h\nu$, 称为能量子。这一假定,称为普朗克量子假设。

量子假设突破了经典物理关于能量连续性概念,开创了量子物理学的新纪元。

但是,新观点、新概念不是容易被人接受的。尽管普朗克假设可以很好地解释与实验符合得相当好的普朗克公式,但在当时并未引起很多人的注意,就连普朗克本人,也并不明白引入“能量子”概念到底是数学上的技巧,还是有深刻的物理意义。在他成功地导出公式(1-3)'以后许多年,他还经常卖力地试图在经典物理的基础上理解黑体辐射,试图使量子概念适合经典理论,仅仅是由于他的反复失败,才使他最后相信,不可能在经典物理的框架上求得说明。

还应当指出,普朗克起初把他的能量子概念仅仅局限于谐振子的发射和吸收机理上。关于辐射场,他认为辐射能既经发射之后,连续分布在空间,以波的形式传播着。是爱因斯坦(Einstein)第一个把能量子概念推广到辐射场本身,揭示了光的粒子性,成功地解释了光电效应。

二、光电效应 爱因斯坦光子理论

大家知道,赫兹(Hertz)在 1866—1888 年作出实验首先证实了电磁波的存在。也正是在此期间,他在进行电磁实验的过程中,首先发现了后来使经典电磁理论陷入困境的光电效应。赫兹发现,当阴极受到紫外光照射时,两极间的放电就比较容易。当时对其机理还认识不清,直到后来电子被发现后,才认识到这是由于紫外光

照射,大量电子从金属表面逸出的缘故.在光的作用下,电子从金属表面逸出现象,称为光电效应.被逸出的电子称为光电子.经过实验研究,发现光电效应的基本特点是:

1. 对于一定的金属,存在一个确定的临界频率 ν_0 ,当照射光的频率低于 ν_0 时,不论光多么强,受照的金属都不会发射电子.

2. 每个光电子的初动能仅决定于照射光的频率,并与之成线性关系,而与光的强度无关.

3. 不管光多么弱,从光照射到观测到光电子,延迟时间极短,大约不超过 10^{-9} s.

对这三点经典电磁理论无法解释.因为按照经典电磁理论,辐射场连续地输送能量,而电子则从辐射场连续地吸收能量,这样一来,只要光的强度足够供应电子从金属逸出所需的能量,则在任何频率下都会发生光电效应,且光电子的初动能及延迟时间都决定于光的强度,这些都与实验不符.

为了解决经典物理在光电效应问题上的困难,爱因斯坦接受了普朗克量子假设并加以发展,1905年提出了光子理论.他认为不仅发射或吸收电磁辐射时以“量子”的方式进行,而且辐射场本身也是由“量子”组成的,这些量子称为光量子或光子,每个光子的能量

$$E = h\nu \quad (1-4)$$

按照爱因斯坦的观点,当光照射到金属表面上时,电子吸收光子,如果每个光子的能量大于电子逸出金属表面所需作的逸出功 A 时,则电子吸收一个光子后,立即从金属中逸出(因为一个电子同时吸收两个或两个以上的光子的概率是极小的,可以不予考虑;再者由于电子和晶格离子经常发生碰撞,它连续吸收几个光子而又保持所得能量不损失,直到最后逸出金属的可能性实际上也是不存在的.)逸出时的初动能

$$\frac{1}{2}mv_0^2 = h\nu - A \quad (1-5)$$

显然,当 $\nu < \frac{A}{h}$ 时,电子无法摆脱金属表面的束缚,因而没有电子

发射. $\nu_0 = \frac{A}{h}$ 即为临界频率. 这就圆满地解释了光电效应.

三、康普顿效应 爱因斯坦关系式

光子既具有能量, 根据狭义相对论, 以速度 v 运动的粒子的能量为

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

式中 m_0 为粒子的静质量, 对于光子, $v=c$, 则由上式可知, 光子的静止质量 $m_0=0$, 只具有运动质量 E/c^2 . 再由相对论中的能量动量关系式

$$E^2 = m_0^2 c^4 + c^2 p^2$$

得光子的能量 E 与动量 p 之间的关系

$$E = cp$$

综上所述, 光子的能量与动量是

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ p = \frac{h\nu}{c}n = \frac{h}{\lambda}n = \hbar k \end{cases} \quad (1-6)$$

此二式称为爱因斯坦关系式. 式中 n 表示沿光子运动方向的单位矢量, $\omega=2\pi\nu$ 表示角频率, λ 是波长,

$$k = \frac{2\pi\nu}{c}n = \frac{2\pi}{\lambda}n \quad (1-7)$$

称为波矢. $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, 是量子力学中常用的符号, 读作“ h bar”.

爱因斯坦关系在康普顿(Compton)实验中得到了直接的证实.

1923年, 康普顿发现, X射线被轻原子中的电子散射后波长变长, 而且增加的量随散射角的增加而增大.

按经典电磁理论, 散射波系电子在入射波的作用下进行强迫振动而发射的, 因而其波长应与入射波一样. 但是, 如果将这个过程的看作是光子与电子碰撞的过程, 则能得到完满的解释.

设碰撞前电子的速度很小, 可视为静止, 且电子在原子中的束缚能较 X 射线中光子的能量小得多, 电子可视为自由电子. 在碰撞中电子受到反冲, 而以能量 E_e 、动量 p_e 在与入射线成角度 φ 的方向射出 (如图 1.3).

假如在碰撞过程中能量与动量守恒, 则

$$\begin{cases} h\nu + m_0c^2 = h\nu' + E_e & (1-8) \end{cases}$$

$$\begin{cases} p = p' + p_e & (1-9) \end{cases}$$

式中 m_0 为电子的静止质量.

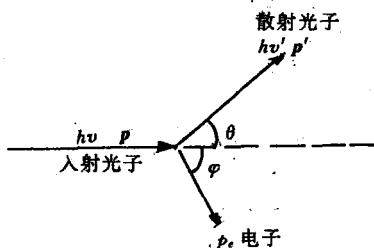


图 1.3

由上两式, 并利用关系式 $E_e^2 = m_0^2c^4 + c^2p_e^2$, 得

$$\frac{1}{c^2} (h\nu + m_0c^2 - h\nu')^2 - (p - p')^2 = \frac{E_e^2}{c^2} - p_e^2 = m_0^2c^2 \quad (1-10)$$

因为 $p = \frac{h\nu}{c}$, $p' = \frac{h\nu'}{c}$, 又

$$p \cdot p' = pp' \cos\theta \quad (1-11)$$

代入(1-10)式, 解出

$$\nu' = \frac{\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}(1 - \cos\theta)} \quad (1-12)$$

利用 $\lambda' = \frac{c}{\nu'}$, $\lambda = \frac{c}{\nu}$

$$\text{上式可改写成} \quad \lambda' = \lambda + \frac{h}{m_0c}(1 - \cos\theta) \quad (1-13)$$

$$\lambda_e = \frac{h}{m_0 c} = 2.43 \times 10^{-12} \text{m}$$

λ_e 称为电子的康普顿波长。

(1-13)式清楚地表明,理论计算的结果与实验结果完全符合。因此,康普顿效应证实了光的确是由一颗颗的光子组成的,单个光子的能量、动量的确遵守爱因斯坦关系,而且如寻常物体那样,在单个碰撞事件中,同样遵守动量及能量守恒定律。这就进一步证实了光的粒子性。

四、光的波粒二象性

至此,我们可以把对光的认识总结一下了。一方面,光具有波动性,这是干涉、衍射现象早已证明了的;另一方面,又具有粒子性,光电效应、康普顿效应同样使人确信无疑。这样,光具有双重性质——波动性和粒子性,光的这种性质称为波粒二象性。爱因斯坦关系正是光的波粒二象性的客观反映,它把单个粒子的能量、动量和描述波动特性的频率、波长密切地联系在一起了。

思考题与习题

1. 试述普朗克量子假设提出的历史背景、基本内容及其重要意义。
2. 爱因斯坦光子理论较之普朗克量子假设有何发展?
3. 康普顿效应在理论上有何重要意义?
4. 什么是光的波粒二象性?
5. 由普朗克公式导出瑞利-金斯公式和维恩公式。
- * 6. 利用普朗克公式,计算平衡时腔内的辐射能密度。

$$u = \int_0^{\infty} \rho_\nu d\nu$$

7. 光照射在照相板上,使 AgBr 分子分解所需的最小能量为 10^{-19}J ,求能使照相板感光的截止波长? 今有一 100W 的灯泡(设 1% 变成光能)距照相板 10m 处,设 AgBr 分子的直径为 $2 \times 10^{-10} \text{m}$,假如按经典理论,分子连续地吸收光能,估算使照相板感光需要多长的曝光时间? 和你的经验一致吗?

8. 角频率为 ω 、强度为 I 的光与法线方向成 θ 角照射在完全反射面

上,求光作用于反射面的辐射压强.

9. 用能量及动量守恒定律证明一个自由带电粒子不能吸收也不能发射一个光子.

§ 1.2 微粒的波动性

前面我们讲了,原先看来是“波”的光,后来实验证明它具有粒子性.与此相反,原先看来是“粒子”的实体(指静止质量 $m_0 \neq 0$ 的粒子),是否又具有波动性呢?这个问题早在 1923 年德布罗意(de Broglie)就提出来了.他想把实物粒子和光的理论统一起来,以克服玻尔理论的困难,提出了实物粒子具有波动性的假设.此假设为尔后许多实验所证实,成为波动量子力学的先导.这一节我们将先叙述玻尔理论,而后讲德布罗意假设,最后介绍证明微粒具有波动性的实验.

一、原子的线光谱和原子的稳定性问题

玻尔理论是在原子线光谱和原子的稳定性问题使经典物理陷入困境的情况下提出来的.

19 世纪末,巴耳末(Balmer)等人对氢原子光谱进行分析整理,发现它由许多线系组成,每一线系的每一条谱线,其波数

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (2-1)$$

$$(m = 1, 2, 3, \dots, n > m)$$

上式称为广义巴耳末公式.式中 R_H 称为里德伯(Rydberg)常数,其实验值为

$$R_H = 1.0967758 \times 10^7 \text{m}^{-1}$$

光谱学家通过对其他元素原子光谱的分析,发现都有类似的规律,并总结出一条更普遍的原则:每一种原子都有它特有的一系列光谱项 $T(n)$,原子光谱的每条谱线的波数都可以表示成两个光谱项之差,即