

武汉大学本科生系列教材

量子力学与原子物理学

张哲华
刘莲君
编著

武汉大学出版社

407484

高等学校教材

量子力学与原子物理学

张哲华 刘莲君 编著



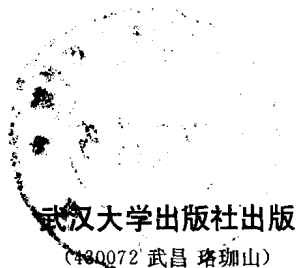
武汉大学出版社

图书在版编目 (CIP) 数据

量子力学与原子物理学/张哲学华, 刘莲君编著. — 武汉: 武汉大学出版社, 1997. 9

ISBN 7-307-02403-9

- I 量…
- II ①张… ②刘…
- III ①量子力学 ②原子物理学
- IV O413.1 O562



武汉大学出版社出版

(430072 武昌 珞珈山)

湖北省京山县印刷厂印刷

(431800 湖北省京山县新市京源大道 58 号)

新华书店湖北发行所发行

1997 年 9 月第 1 版 1997 年 9 月第 1 次印刷

开本: 850×1168 1/32 印张: 18.75

字数: 484 千字 印数: 1—2000

ISBN 7-307-02403-9/O · 179 定价: 19.80 元

本书如有印装质量问题, 请寄承印厂调换

前 言

本书是作者在武汉大学物理系十多年来讲授原子物理学、量子力学以及高等量子力学课程的基础上,根据在物理系人才培养基地班连续四届讲授量子力学与原子物理学课程的讲稿整理写成的。现拟将本书作为量子力学与原子物理学课程的教材。开设量子力学与原子物理学课程是教学改革的一项尝试:将普通物理课程中的原子物理学与理论物理课程中的量子力学打通,合成一门课程。这样处理,显然可以减少总课时。尤其重要的是,讲述原子物理学的内容直接以量子力学为基础,比以玻尔量子论为基础要好些;讲述量子力学又大量以原子物理学的事实为例(自然,也引用了其它方面的例子),叙述得也系统些。至于分子物理学、原子核和基本粒子物理学部分拟另作专门课程来开设。

本书共分十一章。若单从原子物理学一方面来看,包括以下五部分内容:(1)重要的实验现象;(2)单电子原子(氢原子和类氢体系,也包括讨论碱金属原子)的态和玻尔-薛定谔能级;(3)电子自旋,以及单电子原子能级的精细结构和在外电、磁场中能级的再分裂;(4)多电子原子;(5)原子与光的相互作用和原子与实物粒子的碰撞问题。同样,若单从量子力学一方面来看,包括以下七部分内容:(1)实验基础;(2)基本假设、概念和理论;(3)表示方式(狄喇克符号和表象);(4)角动量理论;(5)几种典型体系:一维体系、在中心势场中运动、在电磁场中运动以及全同粒子系;(6)几方面的近似方法;(7)两个专题:量子跃迁和散射。本书将上述两方面的内容尽力和谐地合为一体,期望能够得到一举两得的效果。

对书中的错误和不妥之处,恳请读者批评指正。感谢武汉大学
教务处、物理系和出版社的支持,使本书得以出版。

张哲华 刘莲君

于武汉大学物理系 1996 年 6 月

目 录

第一章 实验基础	1
§ 1.1 物质的原子性	1
1.1-1 物质的原子学说的建立	1
1.1-2 原子的质量与大小	3
1.1-3 布朗运动与佩林实验	4
§ 1.2 电子	6
1.2-1 法拉第电解定律与电荷量的基本单元	6
1.2-2 汤姆逊从阴极射线实验发现电子并测定电子荷质比	8
1.2-3 密立根油滴实验测定电子的电荷量	11
1.2-4 电子的质量和经典半径	14
§ 1.3 原子的核式结构	14
1.3-1 卢瑟福的原子核式结构模型的提出	14
1.3-2 卢瑟福的 α 粒子散射理论	16
1.3-3 卢瑟福理论的实验验证	20
1.3-4 原子核简介	23
1.3-5 原子核式结构模型的困难	25
§ 1.4 光的波粒二象性	27
1.4-1 黑体辐射与普朗克的量子假设	28
1.4-2 光电效应与爱因斯坦的光量子论	33
1.4-3 X射线的康普顿散射	38
§ 1.5 原子态的量子化	44
1.5-1 原子光谱的实验规律	44
1.5-2 玻尔的氢原子量子论	50

1.5-3	夫兰克-赫兹实验	59
1.5-4	玻尔量子论的地位和局限性	62
§ 1.6	实物粒子的波粒二象性	63
1.6-1	德布罗意假设	63
1.6-2	电子的晶体衍射实验	65
1.6-3	量子力学的建立	69
	习题	70
第二章 量子力学原理(I):波函数及薛定谔方程		76
§ 2.1	波函数及其统计解释	77
2.1-1	波函数	77
2.1-2	波函数的统计解释	78
2.1-3	波函数归一化; δ 函数与平面波波函数的归一化	79
2.1-4	粒子动量取值的几率分布	82
2.1-5	坐标和动量的期望值	84
2.1-6	量子态;量子力学的第一条假设	86
§ 2.2	态叠加原理	88
§ 2.3	薛定谔方程	90
2.3-1	方程的引出;量子力学的第二条假设	90
2.3-2	几率守恒与几率流密度	93
2.3-3	波函数的标准条件	95
§ 2.4	定态	95
2.4-1	定态与定态薛定谔方程	96
2.4-2	非定态由若干定态叠加而成	98
§ 2.5	一维定态问题	101
2.5-1	无限深方势阱	101
2.5-2	一维谐振子	103
2.5-3	势垒穿透	111
	习题	115
第三章 量子力学原理(II):力学量算符及量子条件		123

§ 3.1	算符及其运算规则	123
3.1-1	黑伯特空间及算符	123
3.1-2	量子力学中常用的几类算符	125
§ 3.2	力学量用算符表示	130
3.2-1	力学量在体系一个运动状态下的期望值	130
3.2-2	力学量的可能取值	132
3.2-3	力学量在体系一个运动状态下可能取值的几率分布	133
3.2-4	表示力学量的算符必须满足的条件	138
3.2-5	量子力学的第三条假设	139
§ 3.3	几个基本的力学量算符	139
3.3-1	坐标算符及坐标算符的函数	139
3.3-2	动量算符及动量算符的函数	140
3.3-3	体系的哈密顿算符	144
3.3-4	角动量算符	145
3.3-5	宇称算符	150
§ 3.4	量子条件	152
3.4-1	基本量子条件	152
3.4-2	两个有经典对应的力学量算符之间的对易关系	155
3.4-3	应用量子条件确定力学量算符的本征值谱	156
3.4-4	量子力学的第四条假设	165
§ 3.5	两个力学量同时有确定值的条件	166
3.5-1	两个力学量算符对易是它们有共同的本征函数 完备组的充分和必要条件	166
3.5-2	两个力学量算符不对易与测不准关系	169
§ 3.6	体系的守恒量	172
3.6-1	力学量的期望值随时间的变化	173
3.6-2	体系的守恒量	174
3.6-3	体系的力学量完全集合	177
习题	181

第四章 中心力场——氢原子和碱金属原子..... 187

§ 4.1	粒子在中心力场中运动的一般特点	187
4.1-1	定态薛定谔方程分离变量;角向方程和角向函数	187
4.1-2	径向方程,径向函数和体系的能量	189
4.1-3	束缚定态的能级和波函数	190
4.1-4	粒子坐标取值的几率密度及几率流密度	192
4.1-5	例:无限深球方势阱和粒子自由运动	193
§ 4.2	库仑场;氢原子	198
4.2-1	将两体问题归结为一个电子在库仑场中运动问题	199
4.2-2	氢原子束缚定态的径向方程;能级和波函数	201
4.2-3	氢原子内电子坐标取值的几率分布,角向分布 和径向分布	208
4.2-4	氢原子内的电流密度分布及原子的磁矩	213
4.2-5	氢原子定态之间的量子跃迁	215
§ 4.3	类氢体系	216
4.3-1	氢的同位素	216
4.3-2	类氢离子	218
4.3-3	特殊的类氢原子	219
4.3-4	里德伯原子	222
§ 4.4	碱金属原子	223
4.4-1	原子实的势场	224
4.4-2	原子束缚定态的能级	225
	习题	231

第五章 态和力学量的表示方式

§ 5.1	狄喇克符号	237
5.1-1	体系态矢量的狄喇克符号:右矢	237
5.1-2	右矢空间的对偶空间中的矢量:左矢	238
5.1-3	算符的表示	240
5.1-4	基矢量组的正交归一性和完备性表示式	242
§ 5.2	态矢量的表象	244
5.2-1	表象的概念	244

5.2-2	态矢量的表象	244
§ 5.3	力学量算符的表象	247
5.3-1	算符的表象	247
5.3-2	几个基本表象	250
§ 5.4	量子力学公式及方程的表象表述	256
5.4-1	体系态矢量的归一化条件	256
5.4-2	力学量在体系一个态下的期望值	257
5.4-3	力学量算符的本征值方程及方程的求解	259
5.4-4	力学量算符的本征矢量组的正交归一性和完备性 表示式	261
5.4-5	力学量在体系一个态下可能取值的几率分布	264
5.4-6	薛定谔方程	265
5.4-7	基本量子条件	267
§ 5.5	表象变换	269
5.5-1	两个表象的基矢量组之间的变换	269
5.5-2	态矢量的表象变换	272
5.5-3	力学量算符的表象变换	273
5.5-4	不同表象的等价性	273
	习题	274

第六章	电子自旋及一般角动量	281
§ 6.1	电子自旋的引出	282
6.1-1	乌伦贝克-高德斯密特假设	282
6.1-2	斯特恩-盖拉赫实验	285
§ 6.2	电子的自旋算符和自旋态矢量	290
6.2-1	电子的自旋算符	290
6.2-2	泡利算符	292
6.2-3	\hat{S}_z 表象和泡利矩阵	294
6.2-4	电子自旋算符的本征矢量	295
6.2-5	电子自旋态的一般态矢量	298
§ 6.3	计入自旋的电子运动态矢量及运动方程	299

6.3-1	电子运动的态矢量	299
6.3-2	运动方程	300
6.3-3	方程的分离变量解法	301
6.3-4	电子自旋共振	302
§ 6.4	一般角动量的基本知识	310
6.4-1	角动量算符的定义式	310
6.4-2	角动量算符的本征值问题	311
6.4-3	角动量算符的矩阵表示	312
§ 6.5	两个角动量的耦合; 克累布施-戈登系数	315
6.5-1	两个独立角动量耦合而成的总角动量算符	315
6.5-2	无耦合表象与耦合表象	316
6.5-3	总角动量算符的本征值问题	318
6.5-4	克累布施-戈登系数	319
	习题	324

第七章 原子光谱的精细结构

§ 7.1	定态微扰论	330
7.1-1	瑞利-薛定谔微扰展开; 非简并情况和简并情况	331
7.1-2	微扰展开的适用条件	341
7.1-3	应用举例	341
§ 7.2	变分法	350
7.2-1	薛定谔变分原理	350
7.2-2	瑞利-里兹变分方法	354
7.2-3	应用举例: 氢原子的基态	357
§ 7.3	氢原子光谱的精细结构	360
7.3-1	电子的自旋-轨道相互作用	360
7.3-2	另外两项相对论性修正	362
7.3-3	氢原子能级的精细结构	363
7.3-4	氢原子光谱的精细结构	369
7.3-5	兰姆位移	371
§ 7.4	碱金属原子光谱的精细结构	375

习题	378
第八章 电磁场中的运动	385
§ 8.1 粒子在电磁场中的运动方程	385
8.1-1 粒子在电磁场中运动的哈密顿算符	385
8.1-2 几率密度随时间演化及几率流密度	387
8.1-3 规范不变性	387
8.1-4 粒子在恒定均匀磁场和电场中的运动(朗道能级、量子霍尔效应和 AB 效应)	388
8.1-5 超导现象(零电阻现象和迈斯纳效应)	394
8.1-6 电子在电磁场中运动计入自旋和相对论性修正后的哈密顿算符	398
§ 8.2 恒定均匀磁场中的原子	398
8.2-1 体系的哈密顿算符	399
8.2-2 强场情况:正常塞曼效应	399
8.2-3 帕邢-贝克效应	402
8.2-4 弱场情况:反常塞曼效应	405
8.2-5 原子的磁矩和磁化率	409
§ 8.3 恒定均匀电场中的原子	413
8.3-1 线性斯塔克效应	414
8.3-2 平方斯塔克效应	421
8.3-3 原子的电偶极矩和电极化率	424
8.3-4 原子的场致电离	428
习题	429
第九章 全同粒子系——多电子原子	433
§ 9.1 全同粒子系波函数的粒子交换对称性	434
9.1-1 全同性原理和粒子交换对称性	434
9.1-2 量子力学的第五条假设	436
9.1-3 独立粒子模型	436
9.1-4 泡利不相容原理	439

9.1-5	二电子体系	440
§ 9.2	氦原子	444
9.2-1	基态	445
9.2-2	激发态	446
9.2-3	能级和光谱	451
§ 9.3	多电子原子:原子的电子壳层结构	453
9.3-1	中心场近似下单电子的定态	454
9.3-2	原子的电子壳层结构	455
9.3-3	原子的电子组态	456
9.3-4	单电子定态的能量和波函数	457
9.3-5	元素周期表	459
§ 9.4	多电子原子:原子态,能级和光谱	468
9.4-1	原子态; LS 耦合与 jj 耦合	468
9.4-2	原子的项能及其精细结构	474
9.4-3	原子能级的反常塞曼分裂与原子的磁矩	481
9.4-4	原子光谱	484
§ 9.5	X射线	485
9.5-1	X射线的发射谱	485
9.5-2	X光电子能谱与俄歇电子能谱	492
9.5-3	X射线的吸收谱	494
	习题	496

第十章	量子跃迁——原子的光吸收与发射	501
§ 10.1	跃迁及跃迁几率	501
10.1-1	基本概念	501
10.1-2	含时间微扰论;跃迁几率的近似表示式	503
10.1-3	常微扰	507
10.1-4	周期性微扰	508
10.1-5	能量-时间测不准关系	509
§ 10.2	原子的光吸收与发射	512
10.2-1	爱因斯坦辐射理论	512

10.2-2	光吸收系数的表示式;电偶极近似	515
10.2-3	电偶极辐射跃迁选择定则	519
10.2-4	原子的光电离	522
10.2-5	激光	527
	习题	534
第十一章	散射	538
§ 11.1	碰撞过程;散射截面	539
11.1-1	散射截面	539
11.1-2	从质心坐标系变换到实验室坐标系	541
§ 11.2	势散射的定态描述;中心场散射与分波法	543
11.2-1	定态描述,散射振幅与散射截面	543
11.2-2	中心势场中的散射,分波法	545
11.2-3	分波法的适用范围	551
11.2-4	球方势阱的低能散射;冉绍尔-汤森效应	553
11.2-5	库仑势场的散射	555
§ 11.3	势散射的时间相关描述;玻恩近似	557
11.3-1	时间相关描述,跃迁几率与散射截面; 玻恩近似	557
11.3-2	玻恩近似的适用条件	559
11.3-3	高速带电粒子对原子的弹性散射	561
§ 11.4	全同粒子的势散射	564
11.4-1	微分散射截面	564
11.4-2	电子-原子弹性散射	569
	习题	576
附录 1	常用物理学常数	582
附录 2	单位换算	584
主要参考书目	585

第一章 实验基础

本章叙述一些实验现象,主要是原子的以及与原子有关的重要实验现象,它们是量子力学与原子物理学赖以建立的实验基础。首先,第一、二、三节分别介绍物质的原子性、组成原子的一种基本粒子——电子和原子的核式结构;后面,第四、五、六节分别介绍光的波粒二象性、原子态的量子化和实物粒子的波粒二象性。波粒二象性是物质的基本特性,是原子内部运动状态量子化和原子呈现出诸多量子效应的原因,是量子力学(这里指波动力学)建立的出发点。

§ 1.1 物质的原子性

1.1-1 物质的原子学说的建立

物质的原子论导源于古希腊的自然哲学家。特别是德谟克利特(Democritus,公元前460—370年)等人,臆测宇宙是由无限广延的虚空和极其微小、坚硬不能穿透并且不可再分割的颗粒——“原子”组成,原子在虚空中不断地运动着,由原子组成各种不同的物质,各种物质的区别只在于原子的数目、形状、大小和位置以及排列方面的不同。“原子”一词在希腊文中即意为“不可分割”。当时,物质的这种原子观遭到亚里士多德(Aristotle,公元前384—322年)等人的非难和排斥,他强烈地坚持物质的连续性观念。原子论由于带有无神论的色彩,长期以来受到压制,被中止了很久,

直到 17 世纪,随着实验技术的发展,在科学实验事实的基础上才又重新被提出来。

1662 年,波义耳(R. Boyle)从实验上发现了气体的 P - V 定律;过了 100 多年后,于 1787 年查理(J. A. C. Charles)发现了气体的 V - T 定律和 P - T 定律,1802 年盖·吕萨克(J. L. Gay-Lussac)发表了他独立发现的气体的 V - T 定律。在化学界,1777 年拉瓦西(A. L. Lavoisier)创立了燃烧论;关于化合物中各元素之间的质量关系,1799 年普劳斯特(J. L. Proust)发现了定比定律,1803 年道尔顿(J. Dalton)提出倍比定律,1792—1794 年李黑特(J. B. Richter)发现了当量定律并在 1803 年由道尔顿予以完善;1808 年盖·吕萨克发现气体反应体积比定律。为了解释这些实验现象和规律,在物理学和化学中分别提出了分子运动论和原子分子论。

早在 1658 年,伽森狄(P. Gassendi)就提出物质是由分子构成的假设,设想分子是硬粒子,能朝各个方向运动,并且由此进一步解释了物质的固、液、气三种聚集态。1666—1667 年波义耳在他的《形与质的起源》一书中详尽地论述了他称之为“粒子哲学”的假说。1678 年胡克(R. Hooke)提出气体由分子组成,气体的压力是由于气体分子与容器壁相碰撞的结果。1738 年伯努利(D. Bernoulli)发展了上述假说,指出分子运动量的改变产生压力,他借助于分子运动的模型,由气体分子与容器壁碰撞的概念导出了波义耳定律。1746—1748 年罗蒙诺索夫(M. B. Ломоносов)继续发展了伯努利的理论,提出气体分子运动是无规则的这个重要思想,肯定了运动守恒原理在分子运动中的正确性。1798 年伦福德(C. Rumford)开创了热运动论。到了 19 世纪,分子运动论得到飞跃的发展,特别是克劳修斯(R. Clausius,在 1857 年)、麦克斯韦(J. C. Maxwell,在 1860 年)和玻尔兹曼(L. Boltzmann,在 1868 年)的工作使他们成为分子运动论的主要奠基者。分子运动论在应用于讨论气体的物质性质时假设:气体由大量称之为分子的颗粒组成;这

些分子处于不停的、无规则的运动中，彼此之间作弹性碰撞，并且与气体容器壁作弹性碰撞；这些分子是完全相同的，分子的尺寸与分子之间的距离相比小得多；气体的温度正比于分子的平均动能。分子运动论满意地解释了气体定律。

同一时期，1808 年道尔顿提出化学中的原子假说：一切物质都是由大量分立的原子组成的，原子不能再分；种类相同的原子其质量、形状和性质等都相同，种类不同的原子其质量、形状和性质不同；每一种物质都由它自己的原子组成，元素由“简单原子”组成，化合物由“复杂原子”组成，“复杂原子”由为数不多的“简单原子”组成。应用原子假说，可以解释定比定律、倍比定律等，并且引入原子量的概念。1811 年阿伏伽德罗(A. Avogadro)引入分子的概念，首次明确地区分了原子和分子，指出原子是元素的最小颗粒，而分子是由几个原子结合在一起组成的单质或化合物的最小颗粒，即物质能够独立存在并不改变性质的最小颗粒。这样，原子假说就发展成为原子分子论。阿伏伽德罗并且指出，只要假设相同体积的任何气体在相同温度和相同压强下含有相同的分子数，则气体反应体积比定律就一定成立。这个假设后被称为阿伏伽德罗定律。

分子运动论和化学中原子分子论的成功，证实了物质的原子性，实物物体不论气态、液态还是固态都是由大量的原子或分子组成的，物质的组成是不连续的。

1. 1-2 原子的质量与大小

根据化学的定律并且利用化学的方法，可以确立每种元素一个原子的相对质量，称为元素的原子量。最初，按照道尔顿建议的标度，定氢的原子量为 1；后来，代之以定氧的原子量为 16；现今，按 1961 年国际会议的确定，将碳在自然界中最丰富的一种同位素的原子量定为 12，则氢的原子量取为 1.008，氧的原子量取为 15.999。由此，可以确立各种单质或化合物一个分子的相对质量，