量子力学基本原理和计算方法

LIANGZILI XUE JI BEN YUANLI HE JISUAN FANGFA

甘肃人民出版社

量子力学基本原理和计算方法

钱 伯 初

甘肃人民出版社

责任编辑：梅榆生
封面设计：刘云石

量子力学基本原理和计算方法

钱伯初

甘肃人民出版社出版
（兰州第一新村51号）
甘肃省新华书店发行　　兰州新华印刷厂印刷

开本850×1168毫米1/32　印张10.25　插页2　字数269,000
1984年12月第1版　　1984年12月第1次印刷
印数：1——4,200

书号：13096·96　　定价：1.95元

序　言

本书是为初学量子力学而又想切实掌握其基本计算方法的读者编写的。

按照编者讲授量子力学课程的多年经验，学生在学习量子力学时，如果对于基本原理缺乏全面的理解，想掌握其计算方法几乎是不可能的。因此，对于量子力学的基本原理和基本概念，仍按教科书的形式作了全面而又扼要的叙述。书中编入了较多的例题，共一百多个，这是本书内容的重要组成部分，也是本书区别于一般教科书的主要方面。通过这些例题，具体阐明量子力学的基本计算方法；这些例题小部分属于常规的习题，而大部分选自近年来国内外研究生的考试题。读者如能对这些例题的解法细心领会，不仅能加深对量子力学理论的理解，又能提高自己的解题能力。

对四年制综合大学物理专业的学生来说，学习量子力学所需要的数学知识都已经在高等数学和数学物理方法课程中学过。对于这些读者，书末的数学附录似乎是多余的，而对那些不熟悉这些数学工具的读者，希望书后的附录能够为他们消除大部分数学障碍。至于线性算符，矩和阵矢量空间这几部分，由于数学概念和物理内容的联系过于密切，所以就写在正文中了。

在第一章中突出了量纲分析方法，对于原子物理学中的主要特征量，作了简明扼要的论证。这是编者在教学中的一种新的尝试；国外教材也有这样做的。撇开具体的物理模型，单纯从量纲关系讨论公式的结构，往往使初学者感到难以掌握。其实，只要

抓住若干典型例子，反复揣摩，量纲分析方法是不难掌握的。阅读本书后，如果读者能在适当程度上掌握量纲分析方法，编者将感到欣慰。

编者水平有限，本书编写得又比较匆忙，错误在所难免，希望读者批评指正，以便改正。

编者　于兰州大学

1983年2月

目　　录

第一章　物理量的量纲和数量级

§1.1　黑体辐射定律和普朗克常数

量子论是和20世纪一起来到人间的．1900年，普朗克为了解释黑体（空窖）辐射能量按频率 ν 的分布规律，突破了经典物理理论，在人类历史上第一次提出了量子化假设，认为原子、分子等物质只能一整份一整份地吸收或放出辐射能（电磁波），每一份能量为 $h\nu$．h 是一个普适常数，后人称之为普朗克常数，其数值为

$$h = 6.626196 \times 10^{-27} \text{尔格·秒}$$

黑体辐射的详细理论在任何一本统计物理学教科书中均有叙述，这里不再重复．但是我们将从量纲的角度来讨论这个问题．

用耐热材料做一个带有观测窗口的空窖，加热至温度 T，使与窖内辐射场达到热平衡．实验表明，辐射场的能量密度 u（单位体积中的辐射能）与温度 T 的 4 次方成正比，而与窖壁材料的具体性质无关：

$$u = AT^4 \qquad (1)$$

这就是有名的四次方定律．系数 A 既然与具体物质材料无关，则它只能由普适常数构成．根据经典物理（这里是指统计物理和电动力学）理论，凡是热平衡条件下的统计物理问题，必和玻耳兹曼常数 k 有关；凡是电磁辐射问题，必和光速 c 有关．因此，能量密度 u 应该和 c，k，T 有关．这些量的量纲是（以方括号〔〕表示量纲）

$$[u] = [\text{能量}]/[\text{长度}]^3$$

$$[c] = [\text{长度}]/[\text{时间}]$$

$$[k]=[\text{能量}]/[\text{温度}]$$

$$[T]=[\text{温度}] \qquad [kT]=[\text{能量}]$$

很明显，为了使(1)式右端不出现〔温度〕，系数A中应该含有因子k^4。同样明显的是，如系数A仅由k和c构成，由于〔c〕中有〔时间〕，(1)式两端的量纲无论如何总不能一致。由此可知，A中还应该包含一个新的普适常数。以$\hbar$表示这个新的常数，它的量纲应该是〔能量〕·〔时间〕，它和光速c应该以乘积的形式出现在(1)式中：

$$u=B(kT)^4/(c\hbar)^3 \qquad (2)$$

B为无量纲系数。出现在(2)式中的新的普适常数$\hbar$，实质上就是普朗克常数。如取

$$\hbar=h/2\pi=1.0545919\times10^{-27}\text{尔格·秒}$$

则(2)式中纯系数B的数量级为1。由量子统计物理求得B的精确数值为$\pi^2/15$。

以上的讨论也可以换一种逻辑程序来进行，即以承认量子论观点作为前提。量子论的一个基本观点是，凡是量子现象，必与普朗克常数$\hbar$有关。如果承认空窖辐射场是一个量子化体系（光子气体），则其能量密度u应该是T，k，c，$\hbar$的函数。现在从量纲角度来找出u的可能构造方式。u的构造式中必须不出现〔温度〕和〔时间〕，为此，u应该直接由(kT)及$(c\hbar)$构成。由于

$$[kT]=[\text{能量}] \qquad [\hbar c]=[\text{能量}]\cdot[\text{长度}]$$

唯一可能的构造方式为(2)式。可见，四次方定律的出现是量子论观点的必然结果。

〔例1〕 实验发现，经由观测窗口射出的黑体（空窖）辐射通量密度J_u（单位时间内每单位面积射出的辐射能）和温度T成4次方关系（Stefan定律）：

$$J_u=\sigma T^4$$

系数σ称为Stefan常数，其实验值为

$$\sigma=5.67\times10^{-8}\text{瓦/米}^2\cdot\text{开}^4$$

$$=5.67\times10^{-5}\text{尔格/秒·厘米}^2\cdot\text{开}^4$$

试从理论上导出 J_u 和能量密度 u 的关系，从而得出 σ 的理论构造式，并用以估计普朗克常数 $\hbar$ 的数量级。

解：以 ΔS 表示窗口面积，n 为其外向法线方向。（图1—1）辐射场也就是光子气体，光子速度 c，运动方向完全混乱（各向

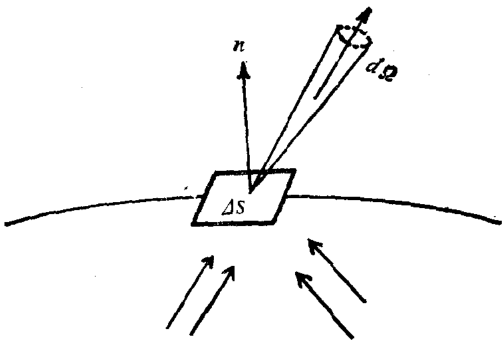

图 1—1

同性），方向在 $d\Omega$ 范围内的几率为 $d\Omega/4\pi$，对于这种光子，观测窗口的有效截面为 $\Delta S\cdot\cos\theta$。因此，沿 $d\Omega$ 方向射出窗口的光能流量为

$$cu\Delta s\cdot\cos\theta\cdot d\Omega/4\pi$$

总能流为

$$\frac{dW}{dt}=\int_{\theta<\frac{\pi}{2}} cu\Delta s\cdot\cos\theta\cdot\frac{d\Omega}{4\pi}$$

$$=cu\Delta s\cdot\frac{1}{2}\int_0^{\pi/2}\cos\theta\sin\theta d\theta$$

$$=\frac{1}{4}cu\Delta s$$

辐射通量密度为

$$J_u=\frac{dW}{dt}\Big/\Delta s=\frac{1}{4}cu \qquad (4)$$

和（3）式比较，得到 Stefan 常数 σ 的理论值

$$\sigma = cu/4T^4 = Bk^4/4c^2\hbar^3 \qquad (5)$$

作为数量级估计，可取 $B\sim 1$，从而得到

$$\hbar\sim(k^4/4c^2\sigma)^{1/3}\sim 1.2\times 10^{-27}\text{尔格·秒}$$

数量级和实验值符合得很好．

反之，如以k，c，$\hbar$的实验值代入（5）式，并取$B=\pi^2/15$，则得到σ的理论值为

$$\sigma=\frac{\pi^2}{60}\ \frac{k^4}{c^2\hbar^3}=5.66961\times 10^{-5}\frac{\text{尔格}}{\text{秒·厘米}^2\text{·开}^4} \qquad (6)$$

和实验值完全一致．

【例2】 宇宙中充满了 3 °K 的"原始辐射"．试估算

i)能量密度 u 的数值；

ii)全宇宙辐射能总量U；

iii)平均光子数密度 n（单位体积中光子数）．

解：i)由（2）式，令$T=3$开，求得

$u\sim 6.2\times 10^{-13}$尔格/厘米^3

$\sim 0.38eV$/厘米^3．

ii)宇宙半径约为$R\sim 10^{28}$厘米，因此全宇宙"原始辐射"总能为

$$U\sim\frac{4}{3}\pi R^3\cdot u\sim 1.6\times 10^{84}eV.$$

$\sim 1.7\times 10^{75}$个核子～宇宙总质量$\times 10^{-5}$．

iii)取光子平均能量 $\hbar\omega\sim 3kT$，则

$n\sim u/3kT\sim 500$个/厘米^3．

§1.2 原子物理学中的特征量

微观现象最显著的特征就是量子化，许多情况下，主要物理量只能取特定的"特征值"而呈不连续变化．即使是可以连续变化的量，其主要数值也常有一定的数量级，因而仍带有特征量的色彩．量子现象的共同特点是，特征量与普朗克常数有关．

至今公认的一个基本物理事实是，物质的最小构成单位是若干种“基本粒子”，同一种粒子具有完全相同的固有属性，例如所有的电子都有相同的电荷（$-e$），静止质量（m_e）和自旋（$\hbar/2$）[1]。在研究电子的运动时，这些量并不变化，具有普适常数的性质，我们将称之为基本常数或基本量，以区别于其他可变的特征量。

各种量子理论的一个主要内容就是提供一套计算物理量的特征值的方法。但是，有些场合我们并不需要知道这些特征量的精确数值，而只要了解其数量级以及和其他物理量之间的结构关系。这时，用量纲分析方法常常就可以迅速得出结论，而勿需经过复杂的量子力学计算。

一切带电基本粒子的电荷数值，只有2种，即$\pm e$；e表示质子电荷，它是电荷的自然单位。（这里我们不讨论“夸克”的分数电荷问题，因为还缺乏可靠的实验根据。）由基本电荷e，光速c和普朗克常数$\hbar$可以构成一个无量纲常数

$$\boxed{\alpha=\frac{e^2}{\hbar c}=7.297\times10^{-3}\sim\frac{1}{137}}$$

（本书采用CGS－高斯单位系统，$[e^2]=$〔能量〕·〔长度〕）由于历史的原因，α称为“精细结构常数”，其实称它为电磁作用常数更为合适。在原子物理领域，进行量纲分析时，只要灵活运用“精细结构常数”，常常可以根据简单的论据，就导出需要的结论。

下面具体讨论和电子的运动有关的特征量。

（一）能量

1.静止能量　根据相对论质—能关系，mc^2是电子的“静止能量”，（m表示电子静止质量）其数值为$0.51MeV$。[2]

研究电子的运动时，如果能量的变化接近或超过mc^2，我们就说运动是相对论性质的；如果能量的变化远小于mc^2，运动的

性质就是非相对论的，通常称为低速运动。

2.原子的电子能级　原子中外层电子的动能，数量级为$10eV$，属于非相对论范围，因此能级的构造式中不应出现光速c。根据这个判断，唯一可能的结构式为（无量纲系数不再写出）

$$E\sim mc^2\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2=\frac{me^4}{\hbar^2}=\frac{e^2}{a_0} \quad (1)$$

$$\sim 0.51MeV\cdot\left(\frac{1}{137}\right)^2\sim 27eV$$

其中　$a_0=\hbar^2/me^2\sim 0.53\,\text{Å}$　（2）

称为玻尔半径，它刚好是H原子的基态半径。一般原子半径约为1 Å。H原子的基态能级为

$$E_1=-\frac{e^2}{2a_0}\sim -13.6eV \quad (3)$$

（二）长度

1.玻尔半径 $a_0=\hbar^2/me^2\sim 0.53\,\text{Å}$

2.康普顿波长

$$\lambda\!\!\!^{-}_e=a_0\cdot\frac{e^2}{\hbar c}=\frac{\hbar}{mc}\sim 3.9\times 12^{-11}\text{厘米} \quad (4)$$

$$\lambda_e=2\pi\lambda\!\!\!^{-}_e=\frac{h}{mc}\sim 2.4\times 10^{-10}\text{厘米} \quad (5)$$

注意康普顿波长和电荷无关，它既是量子论的，又是相对论性质的，它是量子电动力学中长度的“自然单位”．正负电子对的湮灭，主要发生在这个距离以内。

3.电子的经典半径

$$r_e\sim a_0\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2=\frac{e^2}{mc^2}\sim 2.8\times 10^{-13}\text{厘米} \quad (6)$$

它与$\hbar$无关，是一个非量子论性质的量。

（三）速度

1.光速c，是速度的“自然单位”，也是电磁作用的传播速度。

2.原子中外层电子的"轨道"速度

因为是低速运动，速度的构造式与 c 无关，因此

$$v \sim c \cdot \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{e^2}{\hbar} \tag{7}$$

$$\sim \frac{c}{137} \sim 2.2 \times 10^8 \text{厘米／秒.}$$

这个结果也可以利用具体的力学关系求得

$$\frac{1}{2} m v^2 \sim |E_1| \sim \frac{e^2}{2a_0} \sim \frac{1}{2} \frac{me^4}{\hbar^2}$$

$$v \sim \frac{e^2}{\hbar} \sim c \cdot \frac{e^2}{\hbar c} \sim \frac{c}{137}$$

（四）时间

1.原子中外层电子沿玻尔轨道的运行周期

$$t_0 \sim \frac{2\pi a_0}{v} \sim 2\pi \cdot \frac{\hbar^3}{me^4} \sim 1.5 \times 10^{-16} \text{秒} \tag{8}$$

$$\text{角频率} \omega_0 \sim \frac{v}{a_0} \sim 4.2 \times 10^{16} / \text{秒} \tag{9}$$

2.时间的"自然单位"

$$\lambda e/c = \hbar / mc^2 \sim 1.3 \times 10^{-21} \text{秒} \tag{10}$$

注意：它和电子静止能量 mc^2 的乘积等于普朗克常数$\hbar$. 类似的构造在衰变问题中占有重要地位。衰变粒子的平均寿命 τ 和能量不定值 $\varDelta E$ 之间存在"测不准关系"

$$\tau \cdot \varDelta E \sim \hbar \tag{11}$$

因此

$$\tau \sim \hbar / \varDelta E = \hbar / \varDelta M \cdot c_2 \tag{12}$$

$\varDelta M$为质量不定值. 例如Δ（1236）粒子（p,π 共 振态）的质量为$1236 MeV/c^2$,质量不定值高达$120 MeV/c^2$,寿命仅为5×10^{-24}秒.

（五）角动量 J

以电子的轨道角动量为例,

$$J\sim a_0 mv\sim\frac{\hbar^2}{me^2}\cdot m\cdot\frac{e^2}{\hbar}=\hbar$$

特别简单．这不是偶然的，因为角动量的量纲为〔能量〕×〔时间〕，和$\hbar$ 的量纲一样．而在非相对论范围内，J只能由$\hbar,m,e$构成，但m和e二者的任何组合总不能是无量纲的，故J只能由$\hbar$单独构成．

根据量子力学理论计算，角动量的特征值为

$$J=\hbar\sqrt{j(j+1)}\qquad j=0,1,2,\cdots\ \text{或}\ \frac{1}{2},\ \frac{3}{2},\cdots \tag{13}$$

【例 1】 对于重元素的K层（1s轨道）电子，估算其能量E，轨道半径r和速度v，特别要阐明这些量和原子序数Z的关系．（不考虑相对论效应）

分析：电子的运动受制于电子和原子实（原子核及内层电子）之间的库仑作用势$U(r)$．对于外层电子，$U(r)\sim -e^2/r$，其中一个e属于电子，一个e属于原子实．出现在（1），（2），（3），（7）式中的每一个e^2均由此而来．对于K层（最内层）电子，所受作用势主要来自原子核，核电荷为Ze，因此$U(r)\sim -Ze^2/r$．由此可知，上列各式中的e^2应该换成Ze^2．而得到下列结论：

$$r\sim\hbar^2/mZe^2=a_0/Z \tag{14}$$

$$v\sim Ze^2/\hbar\sim c\cdot(Z/137) \tag{15}$$

$$E\sim -Ze^2/2r\sim -Z^2e^2/2a_0 \tag{16}$$

注意：当Z很大时，v可以接近光速c，这时应该考虑相对论效应．但对中等程度的Z（40—50），相对论效应尚不显著，上述结果大致是正确的．

【例 2】 核力是通过核子之间吞吐π介子而传递的．已知π介子的质量$m_\pi\sim 270m_e$，试估计核力力程r_0的数量级．

解：核力与电荷（电磁作用）无关，因此力程r_0只能由c，$\hbar$和m_π构成．唯一可能的构造方式就是康普顿波长，因此可以

估计

$$r_0 \sim \hbar/cm_\pi \sim \lambdabar_e/270 \sim 1.4\times10^{-13}\text{厘米} \tag{17}$$

核力力程的实验值有各种定义，其数值大致为 2×10^{-13}厘米左右。

【例 3】 估计原子的电矩和磁矩的数量级.

解：以D表示电矩，μ 表示磁矩

$$D \sim ea_0 \sim 4.8\times10^{-10}\times0.53\times10^{-8} \tag{18}$$

$$\sim 2.5\times10^{-18}\,(CGSE)$$

原子中电子沿玻尔轨道的运动，相当于环形电流，按经典电磁学，电流I、面积 S 的电流环相应于磁矩

$$\mu = \frac{1}{c} IS\ (\text{高斯单位系统}) \tag{19}$$

现在I和 S 均与 c 无关，因此 $\mu \propto 1/c$. 另外，在 CGS－高斯单位系统中，

〔电矩〕=〔能量〕／〔电场强度〕

〔磁矩〕=〔能量〕／〔磁场强度〕

〔电场强度〕=〔磁场强度〕，〔电矩〕=〔磁矩〕

由此可知，磁矩的构造式应该是

$$\mu \sim D\cdot\frac{e^2}{\hbar c} \sim ea_0\cdot\frac{e^2}{\hbar c} = \frac{e\hbar}{mc} \tag{20}$$

习惯上，这个数值的一半称为玻尔磁子

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc} \sim 0.93\times10^{-20}\text{尔格／高斯} \tag{21}$$

电子的自旋磁矩刚好等于 μ_B，电子的轨道磁矩（即原子磁矩）则为 μ_B 的整数倍.

导出原子磁矩的另一种方法（常见于各种原子物理教材上的方法）是，以

$$I = ev/2\pi a_0,\quad S = \pi a_0{}^2$$

代入（19）式中，并引用（7）式的结果，求得

$$\mu = \frac{1}{c} IS = \frac{1}{c}\cdot\frac{ev}{2\pi a_0}\cdot\pi a_0{}^2$$