

916231

高等学校教材

理论物理简明教程

第三册

量子力学

张泽瑜 编

高等教育出版社

331

0824

T·3

高等学校教材

理论物理简明教程

第 三 册

量 子 力 学

张泽瑜 编

高等教育出版社

内 容 简 介

本教程共分四册出版,各册分别为理论力学,电动力学,量子力学,热力学和统计物理学。为了在内容上做到少而精,全书对理论物理的各个部分作了通盘考虑;并在体系和阐述方法上做了一些尝试,全部内容可用122课时讲完。本册内容包括:微观粒子的波粒二象性和研究方法,波函数和薛定谔方程,定态问题,力学量算符和力学量值的测量几率,表象理论,电子自旋与角动量的合成,微扰论与量子跃迁现象,全同性原理和多粒子问题。所需时间约为40课时。

本书经国家教委应用物理教材委员会审查推荐作为理工科大学应用物理专业试用教材,也可供相关专业及科技人员参考。

高等学校教材 理论物理简明教程 第三册

量子力学
张泽瑜 编

高等教育出版社出版
新华书店北京发行所发行
重庆印制第一厂印装

开本 850×1168 1/32 印张 6.625 字数170 000

1990年5月第1版 1990年5月第1次印刷

印数0 001—1 360

ISBN7-04-002856-5/O·915

定价 1.50 元

总 序

本书是根据国家教委高等学校应用物理教材委员会的教材规划,结合作者多年来的教学实践编写的。按照各校的实际情况和教材规划的要求,《理论物理简明教程》的授课时间为130学时。据此,我们对课程内容做了比较大的调整,着重阐明基本的物理概念、原理、方法及其应用,给理工科大学生和科技人员准备必要的理论物理基础,为他们掌握新的科学技术提供有利条件。

为此目的,我们想在内容选择,编排系统和阐述方法上做些尝试。希望在内容的选择上能做到少而精;在编排系统上能做到结构合理,比较自然;在阐述方法上能做到便于读者理解和掌握。从这种愿望出发,我们先后编写了讲义,在教学中试用。根据我们的教学实践,全书主要内容可用122课时讲完,每课时60分钟。

本书是在原讲义的基础上经修改后形成的。对于理工科院校的理论物理各部分作了通盘考虑,但为了方便读者,仍以分册出版,包括理论力学,电动力学,量子力学,热力学和统计物理学等四册,它们既构成一个整体,又具有相对独立性,可以单独选用。

国家教委高等学校应用物理教材委员会的同志们审阅了本书初稿,提出了许多宝贵的意见和建议。高等教育出版社的同志们对本书的出版给予了热情的支持和帮助,我们向他们一并表示衷心的感谢。

本书第一册《理论力学》由许崇桂编写,第二册《电动力学》和第三册《量子力学》由张泽瑜编写,第四册《热力学和统计物理学》由李铨编写。由于作者的水平所限,书中一定有不少缺点、错误,敬希读者批评指正。

作 者

1988春于北京

本 册 前 言

本书是《理论物理简明教程》第三册《量子力学》。

牛顿力学是从日常的力学现象（包括行星运动）中总结出来的规律，因此比较容易理解，但不能用它来解决微观世界的力学问题。在讨论到原子领域时，必须用量子力学。量子力学理论是从微观世界中总结出来的，相对于牛顿力学来说，有质的不同，它有其自己独特的规律性和方法论。然而两者在许多概念上又是不能截然分开的。因此，对于一个初学者来说，在根深蒂固的经典力学概念上要去接受量子力学的基本概念和原理，必然会遇到许多困难。有鉴于此，本书作了一些尝试，在读者原有的经典物理知识和原子物理知识的基础上，按照历史发展与实验事实的要求，并用了一些简单的分析数学工具，逐步建立起量子力学的基本概念并阐明其基本原理，而没有把它们作为公理式的假定直接列出，以便读者能较为自然地接受并能基本掌握量子力学的基本概念和原理。同时本书也照顾到量子力学理论本身的完整性和严谨性，以使读者在此基础上可以进一步阅读其它有关的量子力学著作。本册内容，可在40小时内授完。如果讲授时间不够，目录中打“*”号的内容，可以作为学生自学材料或不作要求。

本书第一章是讲微观粒子的波粒二象性和研究方法，这是理解量子力学的总线索。第二章是波函数和薛定谔方程，这是量子力学发展史上的第一块最重要的理论基石。接下来第三章是定态问题，是上章理论的重要应用。第四章进入量子力学的核心部分，讲力学量算符和测量值的几率分布，这部分对初学者来说最不容易理解，但却是十分重要的，不掌握这部分内容就谈不上掌握量子力学。第五章是表象理论，介绍了海森伯提出的量子力学的矩阵形式，这里虽没有新的原理，却是前面薛定谔方法的重要

.. 1 .

7A041/07

开拓，例如在电子自旋问题中是必不可少的形式。接下来是电子自旋和角动量合成一章，它们是研究原子结构时必不可少的。第七章微扰论，介绍薛定谔方程的近似解法并应用于量子跃迁现象，此章属于方法和应用范围。第八章是全同性粒子原理，并把它应用到解决两个全同粒子的问题上如氦原子和氢分子，可以作为处理多体问题的初步介绍。最后是量子力学基本原理的总结，把分散在全书各章中的基本原理归纳起来，以便获得一个全面和扼要的认识。

习题是为巩固基本概念和方法而选的，这对于学好本课程是必需的。

张泽瑜

1988春于清华大学

目 录

第一章 微观粒子的波粒二象性和研究方法	(1)
§ 1.1 量子力学的建立过程	(1)
§ 1.2 量子力学的研究对象和微观粒子的波粒二象性	(3)
§ 1.3 量子力学的研究方法	(7)
习题	(9)
第二章 波函数和薛定谔方程	(10)
§ 2.1 德布罗意假设和德布罗意波	(10)
§ 2.2 微观粒子的波函数	(12)
§ 2.3 薛定谔方程	(14)
§ 2.4 几率流密度	(18)
§ 2.5 波包和群速度	(21)
§ 2.6 位置与动量的不确定关系	(25)
习题	(27)
第三章 定态问题	(29)
§ 3.1 关于一维定态波函数的一些性质	(29)
§ 3.2 一维无限深势阱	(34)
§ 3.3 电子在不均匀位场中的运动	(36)
§ 3.4 矩形位场中的几个例子	(39)
§ 3.5 线性谐振子	(44)
§ 3.6 氢原子	(47)
习题	(60)
第四章 力学量算符和力学量值的测量几率	(64)
§ 4.1 力学量的平均值和力学量算符	(64)
§ 4.2 力学量算符的数学性质	(72)
§ 4.3 力学量算符的本征值和本征函数	(74)
§ 4.4 力学量算符的本征值和本征函数举例	(78)
§ 4.5 本征函数系的性质 (分立谱情形)	(83)

§ 4.6	连续谱本征函数的归一化和它的性质	(86)
§ 4.7	态的叠加原理和力学量值的测量几率	(83)
§ 4.8	两个力学量同时具有确定值的条件	(98)
* § 4.9	不确定关系	(100)
* § 4.10	力学量平均值随时间的变化 爱伦费斯脱定理	(104)
习题		(107)
第五章	表象理论	(109)
§ 5.1	态的波矢量表示	(109)
§ 5.2	算符的矩阵表示	(113)
§ 5.3	量子力学公式的矩阵表示	(115)
§ 5.4	动量表象	(119)
* § 5.5	狄拉克符号	(123)
表象理论小结		(126)
习题		(129)
第六章	电子自旋与角动量的合成	(131)
§ 6.1	电子自旋与乌伦贝克假设	(131)
§ 6.2	电子自旋角动量的对易关系式	(132)
§ 6.3	自旋态的波矢量和算符	(133)
§ 6.4	轨道角动量与自旋角动量的合成	(140)
§ 6.5	任意两个角动量的合成	(145)
* § 6.6	随时间变化磁场中的电子自旋	(146)
习题		(150)
第七章	微扰论	(153)
§ 7.1	无简并的定态微扰论	(153)
§ 7.2	有简并的定态微扰论	(156)
§ 7.3	与时间有关的微扰论	(160)
§ 7.4	光的吸收和发射	(162)
§ 7.5	能量与时间的不确定关系	(166)
§ 7.6	选择定则	(167)
习题		(169)
第八章	全同性原理和多粒子问题	(171)
§ 8.1	全同性原理	(171)

§ 8.2 忽略相互作用的全同粒子波函数 泡利原理	(174)
§ 8.3 两个电子自旋的耦合	(178)
§ 8.4 氦原子	(181)
• § 8.5 氢分子	(186)
习题	(192)
量子力学基本原理总结	(194)
习题答案	(196)
物理常数表	(202)

第一章 微观粒子的波粒二象性和研究方法

量子力学是在本世纪20年代才建立起来的一门物理学科，它的基本任务是研究微观粒子的运动规律（例如原子中电子的运动规律），并成为深入了解物质结构及其特性的基础。近代物理的许多分支，特别是与物质结构有关的，如原子、分子结构及其化学理论，固体理论，原子核理论等都要以量子力学理论为基础。量子力学在近代科技上的应用也愈来愈广泛，如激光、半导体技术、核能应用、新材料的制备等方面都运用了量子力学的大量知识。

下面讲三个问题：量子力学的建立、波粒二象性和研究方法。

§ 1.1 量子力学的建立过程

量子力学的发展与物理其它分支的发展一样，可分成两个基本阶段：第一阶段是积累实验事实，发现个别半经验规律以及提出初步的假设和理论；第二阶段是建立普遍的规律，从统一的观点来认识许多现象。

我们打算全面介绍经典物理在20世纪初所遇到的一些巨大困难以及怎样建立了初步的量子理论，对这方面有兴趣的读者可参考原子物理书籍*。我们只打算讲一下与经典力学有关的问题。经典力学在20世纪初遇到了两方面的困难，一方面它不能用来解释高速物体的运动，如从放射性元素发出的 β 粒子，它的质量会随速度而改变（但如用了相对论，对牛顿力学作必要的修改后，

*《原子物理学》，褚圣麟编，高等教育出版社。

就可应用到宏观范围中的高速物体上去，如加速器中粒子的运动)；另一方面，当把经典力学用到微观范围的运动中去，例如用来研究原子中电子的运动时，这些定律就完全失效了。

根据原子的有核模型，原子中有一个带正电的核，在它的周围有一个或多个电子不停地运动。可是，根据牛顿力学和麦克斯韦电磁场理论，这些电子由于在中心力场中运动，产生了向心加速度，将不断辐射能量，电子轨道半径将逐渐变小最后被吸引到核上而使原子崩溃，但这与原子是稳定的事实不符，这个矛盾最初使人们困惑不解。

玻尔对上述矛盾作了深入的分析。他提出，必须假设原子有某些稳定态，当原子处在这些稳定态时，它不辐射电磁波。玻尔又进一步假定，这些稳定态是由一些新的条件称为量子化条件所决定的，即在稳定态中电子的轨道角动量必须是

$$L = n\hbar = nh/2\pi \quad (n=1, 2, 3, \dots)$$

其中 $\hbar = 6.62559 \times 10^{-34}$ 焦耳·秒，称为普朗克常数。这个常数首先是由普朗克整理了黑体辐射的实验数据得到的。玻尔的第三个假设是当原子从一个能量为 E_m 的稳定态跃迁到另一个能量为 E_n 的稳定态时，为了保持能量守恒，原子将发射（或吸收）能量，这个被发射（或吸收）的能量与一定频率 ν 的单个能量子联系着，有 $h\nu = E_m - E_n$ 的关系式。

以上这些概念是和经典物理学的概念完全不同的。满足特定条件的稳定态概念是一个新的概念。在解释氢原子光谱和只有一个电子起重要作用的其它简单原子光谱时，玻尔思想一直是非常成功的。这种巨大的成功使人们不得不接受玻尔理论，但是这一理论从根本上是违背牛顿定律的。

后来人们对玻尔理论进行了深入的研究，发现它的成就非常有限。从根本上来说，在处理一个电子起重要作用的原子体系时，这个理论是可取的，但当处理两个或更多的电子如氦原子或别的更复杂原子时，人们就不知用什么条件来确定它的稳定态。

曾经作过一些人为的假设，如假定原子中的电子作各种轨道运动并进行各种各样的计算，但都未获成功。当时人们面临这样一个问题，即“怎样发展玻尔理论，以适用于那些复杂的原子？”

海森伯和薛定谔两人对这个问题各自进行了独立的研究，他们几乎同时取得了巨大的成就。他们的思想的共同点都是放弃了牛顿力学中的轨道概念，进而建立了新的力学。这种新的力学的首要任务是为了解决原子中电子的运动问题。使人们惊奇的是，他们创立的新力学从表面看来有迥然不同的形式，海森伯力学是用矩阵表示的，人们称为“矩阵力学”，而薛定谔力学却是用波函数及其微分方程来表示的，故称为“波动力学”。但不久，狄拉克从更高的观点出发证明了两种新理论是完全等价的，我们把这两种新的力学统称为量子力学。

§ 1.2 量子力学的研究对象和微观粒子的波粒二象性

量子力学的研究对象是微观粒子。当微观粒子在微观范围中运动时（如电子在原子大小范围内的运动，电子在晶体晶格间的运动等），必须用量子力学。所谓小范围指的是小到怎样的尺度呢？这与微观粒子的动量有关。微观粒子的动量 p 与一个称为德布罗意波长 λ 的量有如下联系：

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

其中 h 为普朗克常数。如果粒子的运动范围 l 与 λ 有相同的数量级，即

$$l \sim \lambda$$

则微观粒子的运动问题就不能用牛顿力学而必须用量子力学来解决。如考虑原子中的电子运动，电子的质量 $\mu \sim 10^{-30}$ 千克， $v \sim 10^6$ 米/秒，故 $\lambda = h/p \sim 6.6 \times 10^{-10}$ 米，它与原子的大小数量级

相当，因此必须用量子力学。

微观粒子在微小范围中的运动既然不遵守牛顿定律，那么它究竟有什么特点呢？这些特点能否从实验上直接观察到？这是一个十分重要的问题，因为以后我们讨论到量子力学方程的建立以及怎样理解这个方程，都要以此为出发点。下面我们来讨论这个问题。

观察我们周围物体的运动，可以看到有两种完全不同的方式，一种是经典粒子的运动图象，另一种是经典波的运动图象。前一种图象认为质量或能量集中在空间一个小区域内，也就是集中在粒子上，并且粒子以空间轨道形式从一个地点连续运动到另一地点，所谓轨道形式就是粒子的位移是时间的连续变化函数，粒子在某一位置上就有一个瞬时速度，例如子弹的运动就是如此。另一种是经典波的图象，按照这种图象，能量分散在空间传播，因此并无轨道概念，如水波、声波和电磁波的传播方式；波动的另一特征是干涉现象，即如果从一个能源发出一个波，经过两条或若干条不同途径汇聚到空间某点时，该处的能量密度并不是从每条途径过来的能量密度简单叠加，而要视两个波到达该点的位相而定，如果在某点上两个波动有相同的振幅却有相反的位相，那么该点的能量密度就为零。举一个例子来说明这两种图象的不同。如图1.1所示，有一块不能穿透的平板，上面开两个大小相同的小孔 a 和 b ，后面平行地放置一个屏 S 。在板的左方，设想有粒子源 A 发出一束经典粒子，经过 a 和 b 孔，到达屏 S 上，这里假定粒子向各方向均匀发射，并有相同速率。从实验得出，如果开 a 孔关 b 孔，在屏 S 上得到的粒子密度分布如曲线 I_1 所示，只开 b 孔关 a 孔如曲线 I_2 所示，当 a 和 b 孔同时开启，则得粒子密度分布为 I_1 和 I_2 两根曲线叠加，如曲线 I_1+I_2 所示。再设想有一单色光从 A 源出发通过两孔， I_1 和 I_2 两根曲线如分别表示单独开启 a 孔和 b 孔时光的强度分布，当然它们代表单孔衍射的强度分布。那么当 a 和 b 两孔同时开启时，密度分布曲线就不是象 I_1+I_2 那根曲线，

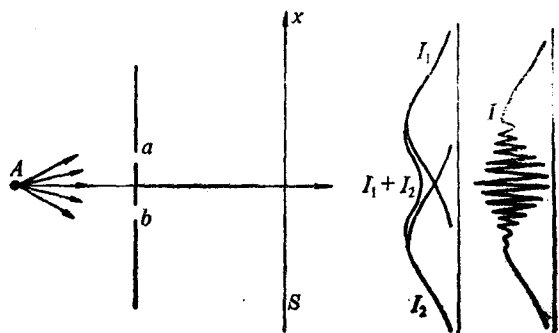


图 1.1.1

而是象曲线 I 所表示的那样，这里有双缝干涉现象发生。根据光的电磁理论，光的强度正比于电场(或磁场)强度的平方，而电场(或磁场)强度是遵守叠加原理的，如 E_a 和 E_b 分别是开启 a 孔和 b 孔在屏 S 上的电场强度，则当两孔都打开时，在屏 S 上的强度 I 分布为

$$I = (E_a + E_b)^2 = E_a^2 + E_b^2 + 2E_a \cdot E_b$$

由上式看出 I 并不正比于 $E_a^2 + E_b^2$ （这一项表示两个孔单独衍射光强度的叠加），因有干涉项 $2E_a \cdot E_b$ 。如果 E_a 和 E_b 大小相等，而位相相反，则得该处的强度为零。在经典波的图象中，能量是连续分布的，如果入射波的能量减小，则屏 S 上各处的能量分布也按比例作相应的减小，这种减小是连续的。

下面我们再来观察微观粒子通过双缝时会得到什么结果。有这样的实验，将一束电荷为 $-e$ 质量为 μ 的电子，通过电压 V 加速得到动量 p 等于 $\sqrt{2\mu eV}$ 的电子。让这样一束电子通过双缝，得到如下结果：

(1) 电子通过双缝在屏上得到的密度分布图样正如同光通过双缝时的强度分布图样，它不是两个单缝图样的简单叠加，也有干涉现象发生，而且与电子相联系的波长正是德布罗意波长：

$$\lambda = h/p.$$

实验证实双缝的干涉图样也正是按这样的波长发生的。

(2) 如果改变上面的实验条件, 不是使一束粒子通过双孔, 而是降低粒子束的密度, 让粒子一个接着一个经过双孔 (即使一个粒子到达屏以后再发射第二个粒子), 则会得到什么结果呢? 首先我们发现屏上每次只能接收到一个粒子, 然而它到达屏上哪一点是无法事先估计的; 其次, 当屏上积累了大量粒子时, 总的就显示了干涉图样, 它与大量粒子一次到达屏时所得到的图样相同。这使我们得出一个重要的结论, 就是干涉的发生, 不只是在两个粒子同时通过双缝造成的, 而是一个电子通过双缝时就包含了干涉的因素。

这是一个非常重要的实验, 通过这个实验可以说明微观粒子既有波动性又有微粒性。屏上每次只能接收到一个粒子, 这是粒子性的表现, 而这个粒子到达屏上各处的几率是不同的, 它包含了波的干涉因素, 这是波动性的表现。

我们说微观粒子有粒子性和波动性并不说明它既是经典粒子又是经典波。它不是经典粒子, 因为经典粒子是沿轨道运动的, 它不可能同时通过两个孔而发生干涉。我们说它不是经典波, 这是因为经典波的能量具有连续分布的特点, 但对微观粒子来说, 它总是以整体出现的, 不可能形成能量的连续分布。

微观粒子既具有粒子性的一面, 然而它却不是沿轨道运动的, 它具有波的干涉性质, 这对于已经习惯于经典图象的人们来说是会感到奇怪的, 但这毕竟是一个千真万确的事实, 而量子力学的任务, 正是要寻找微观粒子所遵从的新的运动规律, 并应用这些规律来阐明在微观领域中出现的各种现象。

对于一个初学者来说常会被纠缠在这样的问题上, 一个粒子既然能从一个地点运动到另一地点, 怎么会没有轨道的概念, 并且又能自身发生干涉现象? 关于这个问题曾有不少学者讨论过, 这里仅举一种学说加以说明。

根据近代场的理论, 真空并不是什么也没有, 而是充满着一种称为场的物质, 它不能直接由实验测量。不过, 这种真空场能

吸收电子获得能量，从而处于一种激发态，这种激发态的场是不稳定的，又将释放出一个电子。这个释放的电子是由场转化而来的，由于电子的不可分辨性，无法说就是原来的那个电子。这一过程在观察者来看，好象电子从一处转移到了另一处，只不过这个释放的电子所处的位置并不确定，有其偶然性，这种偶然性又为统计规律所支配（例如转移到距离小的地方几率大，距离大的地方几率小）。从宏观上看，电子每次转移的距离极小，实际上看不到它的间隔，因此形成了一条连续的轨道。但在微观领域来看就不是如此，例如在原子范围内（半径只有 10^{-8}cm ），如果电子每次转移的距离可以与原子的半径相比，那么在原子中电子的运动就没有轨道概念了，当然，电子在原子中的分布几率还是确定的。再如电子的双缝实验，电子从双缝前面跃到双缝的后面，之所以有干涉图象是因为电子湮没到场中再从场中激发出电子的过程与场所处的边界条件有关，这里的边界条件类似于光经过双缝发生干涉的情况。

§ 1.3 量子力学的研究方法

由于微观粒子具有波粒二象性，所以量子力学的研究方法 with 经典力学不同。经典力学可以研究特定的一个或多个物体的运动规律。而量子力学则不同。当我们用实验方法研究微观粒子的运动规律时，必须分析在相同条件下大量微观粒子的行为，才能总结出其中的规律。例如，在电子束的双缝干涉实验中，我们无法确定每个特定电子到达屏上哪一点，但是当同样的实验重复多次，屏上积累了大量电子时，屏上的电子密度分布就被确定了。量子力学的研究方法就是在一定宏观实验条件下作多次重复实验，并将实验结果与理论作比较看是否相符。在衍射实验中，电子经过一定的加速电压，通过一定大小和位置的双孔再到达屏上，这些都是宏观实验条件。在氢原子中电子在核所产生的库仑场中运

动，我们也把这种库仑场称为宏观条件。其次，我们进行的不是
一次实验，而是多次的重复实验，这可以通过两种方式来完成，一
种方式是同样的实验设备有很多套，而同时在每一套设备上做一
次关于单个粒子的实验，再把所得到的全部结果统计下来；另一
种方式是让大量粒子在一套设备上同时进行实验（我们假定粒子
数密度很小，它们之间不相互干扰），这样，通过一次实验便可
以得出所要的结果，这两种方法是等价的。前面所讨论的电子双
缝实验就是采用这两种方法做的，它们得到相同的电子数密度分
布。然而，如果我们只对一个粒子做一次实验，我们当然无法说
它会到达屏上哪一点，但可以说它在屏上各个位置的几率分布，
而几率分布的数值正比于大量粒子时的密度分布。因此，密度分
布与位置的几率分布两个概念是一致的，前者只是对在一定宏
观条件下大量粒子而言，后者只是对其中的任意一个粒子而言
的。

因此，量子力学是研究大量独立的微观粒子在一定宏观实验
条件下的行为；另一种等效说法是在一定宏观实验条件下研究大
量微观粒子中任意一个粒子的行为，说得更确切些是它的几率性
行为。但这有别于统计物理学中的几率或统计规律。统计物理学所
研究的大量粒子是一定要发生相互作用的，比如说大量气体分子
在一个容器中总是要发生碰撞的，而研究这些分子在各个能级中
的分布数，则是属于统计物理学的范围。

综上所述，结论是：

一、经典粒子概念表示质量或能量都集中在粒子上，粒子作
轨道运动；经典波的概念是能量分散在空间，有干涉现象。

二、微观粒子有波、粒二象性，粒子性表现在实验中粒子总
是整个出现或消灭的；波动性表现在单个粒子也有干涉现象。

三、经典粒子有轨道图象，它的研究方法是经典决定论的方
法，即研究某个特定粒子在某个时刻到达某处；而微观粒子在微
观范围（ $l \sim h/p$ ）中运动没有这种特性。量子力学研究微观粒子