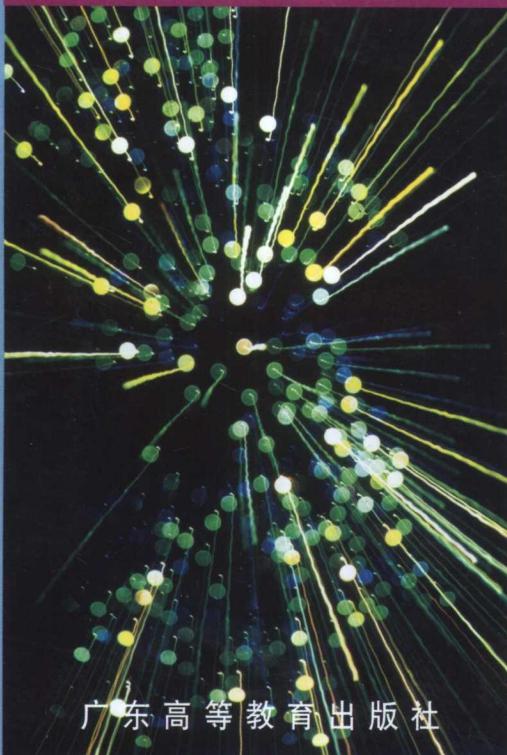


量子力学导论

熊钰庆 主编

何宝鹏 副主编



广东高等教育出版社

广东省高等学校“九五”规划重点教材

量子力学导论

熊钰庆 主 编

何宝鹏 副主编

广东高等教育出版社
·广州·

内容提要

《量子力学导论》是广东省高等学校“九五”规划重点教材。全书共十一章及结束语和附录。其中正文包括绪论，波函数与 Schrödinger 方程，定态 Schrödinger 方程的初步应用，氢原子，量子力学中的力学量，态和力学量的表象，近似方法，量子跃迁，电子自旋，全同粒子，宏观量子效应。每章末附有习题。

图书在版编目 (CIP) 数据

量子力学导论/熊钰庆，何宝鹏主编 .—广州：广东高等教育出版社，2000.2

广东省高等学校“九五”规划重点教材

ISBN 7-5361-2443-0

I . 量… II . ①熊… ②何… III . 量子力学 - 高等学校 - 教材 IV . O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (1999) 第 73226 号

广东高等教育出版社出版发行

茂名广发印刷有限公司印刷

开本：850mm×1 168mm 1/32 10.875 印张 272 千字

2000 年 2 月第 1 版 2002 年 6 月第 2 次印刷

印数：1501 ~ 3500

定价：17.00 元

序

量子力学是在人们探究微观世界的过程中发展起来的一门物理理论，是微观世界运动变化的基本规律。量子力学和相对论被称为20世纪物理学的两大支柱。量子力学是同20世纪一起到来的，“量子”一词就是在1900年普朗克在研究物质发光（黑体辐射）时首先提出来的。到1926年，理论物理学家们从两条路走在一起，建立了量子力学。在此后短短的几年内量子力学便成为一门相当完善的物理理论并开始在认识微观世界方面发挥巨大的作用。人们根据量子力学的理论揭露了物质结构的奥秘，认识了物质发光的机理和电子在原子内和固体内的运动规律。从而研制出一批新物质和新材料，造出了各种激光器和功能神奇的半导体器件。在量子概念提出将近100年后的今天，不仅高新科技的研究离不开量子力学，已经进入家庭的激光视盘机、移动电话和电脑也无一不是在量子力学理论的指导下研制出来的。可以说，在人类的20世纪的物质文明中，很难找出哪一项是与量子力学完全没有关系的。把量子力学看成是20世纪物质文明的一块基石，是并不过分的。

量子力学作为高等学校的一门课程，已有几十年的历史。但是通常只讲授量子力学的概念和原理，很少接触量子力学在高新科技发展中所起的作用，人们只是把它作一门艰深的理论课来对待。在高新科技如此普及的今天，量子力学的这种教学显得落后时代太远了。

现在，21世纪即将到来，人们已普遍认识到这一问题。近年来掀起了一个面向21世纪进行课程体系和课程内容改革的高潮，人们在努力改变着目前的现状。本书就是在这样的背景下，在作者

近几年的实践基础上产生的。

本书是根据国家教育部所提倡的面向 21 世纪课程体系和课程内容改革的精神，为高等师范院校所编写的一本量子力学教材。

本书在编写时所遵循的几点原则是：

1. 根据教学内容现代化的原则，本书在系统讲解量子力学基本原理的同时，介绍原理在近代科技方面的应用和量子力学的最新进展；

2. 根据课程体系改革的精神，基础理论课的总学时应当压缩。本书在内容取舍和讲授次序上作了适当安排，使得量子力学最基本的内容可以在 54 学时之内讲完以适应今后的需要；

3. 但是，过去物理专业课教学中的一大缺点是经典物理太多，近代物理太少。为改变这种不合理的情况，多压缩经典物理内容而加强近代内容。本书的全部内容可供讲授 72 学时的需要；

4. 量子力学已经是一门高度成熟的课程，在系统安排和处理方法上均已定型，但本书仍在教材处理和讲授方法方面做了不少改进，使其更适于教学使用。

华南师范大学一向重视教学质量，注重教材建设。熊钰庆、何宝鹏两位同志讲授量子力学、高等量子力学和量子场论多年，有较高的学术造诣和丰富的教学经验。两位合编的《群论和高等量子力学导论》一书以对难懂的内容的明晰的讲解见长。这次两位和量子力学课程小组的同志们编写此书，又为课程内容的改革做了一件有益的工作。

我们希望本书出版后，在使用的过程中不断丰富完善，为 21 世纪的教材建设贡献出自己的一份力量。

喀兴林

1999 年 1 月 28 日

前　　言

自从 1900 年 Planck 的量子论诞生和 1925~1926 年间量子力学建立至今，将近一百年的发展，使量子力学的理论体系更臻完善，在广泛的应用中显示出巨大的威力。量子力学不仅是物理专业，同时又是相关理、工专业本科生的一门重要的专业基础理论课程。无论国内还是国外，均出版了相当数量的量子力学教科书，其中不乏名著和巨著，作为教材使用选择的余地还是很大的。不过从当前国内教育改革的考虑出发，师范院校物理专业整体教学计划增设了应用性较强的课程，使理论物理包括量子力学在内的课时减幅颇大；而另一方面，量子力学原理和方法的应用又日益深入到许多高科技领域，课程内容应该反映时代特色。作为一个尝试，从内容取舍到具体安排上，我们力图使本书能够成为一本适合师范特点又具有现代气息而用较少学时能够完成教学目的的教材。

本书按 54~72 学时安排教学内容。其中不带星号者为基本内容，适合周学时 3 节、总学时 54 节的安排授课（含习题课）。全部内容（包括带星号者）则需总学时 72 节，即按周学时 4 节授课。这两种方案可根据教学计划分配到量子力学课程的学时作选择。各章节内容亦可根据使用本教材的学校具体情况作适当调整。书中配有深浅程度不同的习题，供教学中选用。

本书由华南师范大学物理系量子力学课程小组编写，其中熊钰庆任主编、何宝鹏任副主编，并负责编制教学大纲和编写计划及统稿。第一、二章由王笑君执笔，第三、四、五、六、九章及结束语和附录由熊钰庆执笔，第七、八章由何宝鹏执笔，第十、十一章由胡连执笔，其中 § 50 由何宝鹏、陈浩执笔。

本书的编写出版得到广东省高教厅和广东高等教育出版社的支持，列为广东省高等学校“九五”规划重点教材之一。承蒙全国高校量子力学研究会理事长、北京师范大学喀兴林教授审阅全书，提出宝贵的修改意见，并为本书作序，此在，编者表示衷心感谢。

限于编者水平，书中难免出现不妥或错误之处，恳请读者批评指正。

编 者

1998 年于华南师范大学

目 录

第一章 绪论	(1)
§ 1 电磁辐射问题中的困难 能量子与光量子论	(1)
§ 2 原子结构问题中的困难 玻尔的原子结构理论	(5)
§ 3 波粒二象性	(8)
习题	(13)
第二章 波函数与 Schrödinger 方程	(14)
§ 4 波函数及其统计诠释	(14)
§ 5 态叠加原理	(17)
§ 6 Schrödinger 方程	(20)
§ 7 概率流密度与概率守恒	(24)
§ 8 定态 Schrödinger 方程	(27)
习题	(29)
第三章 定态 Schrödinger 方程的初步应用	(30)
§ 9 一维无限深方势阱	(30)
§ 10 隧道效应与共振隧穿	(39)
* § 11 一维周期势场	(49)
习题	(58)
第四章 氢原子	(59)
§ 12 电子在中心场中运动	(59)
§ 13 电子在 Coulomb 场中运动	(64)
§ 14 氢原子	(68)
* § 15 原子的电流和磁矩	(75)
§ 16 氢原子的角动量	(77)

§ 17 简单塞曼效应	(80)
习题	(83)
第五章 量子力学中的力学量	(84)
§ 18 算符	(84)
§ 19 力学量对应的算符	(87)
§ 20 Hermite 算符本征函数的正交性和完全性	(90)
§ 21 力学量的统计分布 平均值	(94)
§ 22 不同力学量同时有确定值的条件	(101)
§ 23 不确定度关系	(106)
* § 24 力学量平均值随时间的变化 守恒定律	(110)
习题	(117)
第六章 态和力学量的表象	(121)
§ 25 态的表象	(121)
§ 26 算符的表象 矩阵表示	(127)
§ 27 量子力学的矩阵表示	(130)
§ 28 Dirac 符号	(136)
§ 29 么正变换	(142)
§ 30 谐振子的阶梯算符解法	(149)
习题	(166)
第七章 近似方法	(170)
§ 31 非简并定态微扰理论 电介质极化	(170)
§ 32 简并情况下的微扰理论 氢原子一级 Stark 效应	(180)
* § 33 变分法 氦原子基态	(185)
习题	(190)
第八章 量子跃迁	(193)
§ 34 含时微扰理论 跃迁概率	(193)
§ 35 光的吸收与发射的半经典理论 选择定则	(201)
§ 36 激光的产生 自由电子激光	(208)
习题	(214)

第九章 电子自旋	(215)
§ 37	电子自旋的实验证据和电子自旋的假设 (215)
§ 38	自旋算符 Pauli 矩阵 (218)
§ 39	自旋态的描述 自旋波函数 (222)
§ 40	粒子在电磁场中运动 Pauli 方程 (229)
* § 41	磁共振 (238)
* § 42	总角动量 (243)
* § 43	碱金属原子光谱的精细结构 (249)
* § 44	复杂 Zeeman 效应 (252)
§ 45	两个电子的自旋波函数 自旋单态和三重态 (254)
习题	(258)
第十章 全同粒子	(261)
§ 46	全同性原理 Bosons 与 Fermions (261)
§ 47	全同粒子系统的波函数 Pauli 不相容原理 (263)
§ 48	氦原子（微扰法） (266)
§ 49	氢分子（Heitler-London 法） (273)
习题	(277)
* 第十一章 宏观量子效应	(278)
§ 50	Aharonov-Bohm 效应 Berry 相因子 (279)
§ 51	超导现象与理论简述 (285)
§ 52	Meissner 效应 (289)
§ 53	磁通量子化 (291)
§ 54	Josephson 效应 (293)
§ 55	Landau 能级和波函数 量子 Hall 效应 (302)
习题	(309)
* 结束语	(311)
I	量子力学的基本假设 (311)
II	量子力学理论和方法的发展 (313)
III	关于量子力学理论的解释问题 (317)

附录	(320)
I 常用物理常量	(320)
II 几个常用的积分公式	(321)
III δ 函数	(323)
IV 动量算符本征函数的“归一化”	(326)
V 矩阵	(329)

第一章 绪 论

量子力学是关于微观粒子运动规律的理论，它和相对论一起，构成近代物理学的主要理论基础。本章简要回顾量子力学诞生前早期量子论的要点，为叙述量子力学原理作概念上的准备，特别是光和电子等实物粒子的波粒二象性概念。

§ 1 电磁辐射问题中的困难 能量子与光量子论

一般说来，量子力学诞生之前的物理学称为经典物理学。量子力学诞生于 1925~1926 年，因此我们可以把 1925 年以前的物理学统称为经典物理学。其主要内容包括：处理质点之间机械相互作用及引力相互作用的牛顿力学；处理电磁（光）相互作用的电磁学；处理热相互作用的热力学与统计物理等。当时曾有一种观点，认为物理学的理论已经是完备的了，剩下的仅仅是把这些理论应用于实际问题。但在十九世纪末期，上述经典物理的理论却遇到了一些困难，这些困难预示着物理的理论还不是完备的理论，特别是在低温和微观领域中，我们还需要新的理论。本节就经典物理在电磁辐射问题中所遇到的有代表性的困难作一简单回顾。

一、黑体辐射

这里的辐射指的是热辐射（或光辐射），其本质也就是电磁辐射。我们知道，所有的物体都会发射和吸收电磁波。如果有一种物体，它只吸收外来的辐射而没有反射，则我们称之为绝对黑体，简称为黑体。绝对的黑体是不存在的，但在实验中制作一个简单的近似黑体却并不难。例如可以在封闭的空腔壁上开一个小孔，外来的

电磁波经由小孔进入空腔，由于电磁波再次从小孔穿出来的概率近乎为零，因而此时空腔可以看为一个绝对黑体。当空腔内壁电磁波的吸收与发射相等时，空腔腔体与其内部的温度将是均匀恒定的，此时我们称黑体处于热平衡状态。当时的一个问题，是要研究处于热平衡的黑体内部电磁波能量密度随频率的分布关系。由于黑体内部电磁波包含有各种连续变化的频率，设 $\rho_\nu d\nu$ 是单位体积、频率在 $\nu \sim \nu + d\nu$ 间的电磁波能量，需要寻找的就是 $\rho_\nu d\nu$ 与 ν 的关系。

最早的一个关系式是由德国物理学家维恩 (Wien) 根据热力学的讨论和经实验分析得出的半经验公式^{①②}

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

其中 c_1, c_2 为常数， T 为绝对温度。这一经验公式在高频段与实验吻合得很好，但在低频段与实验结果不符。随后，英国物理学家瑞利 (Rayleigh)^③ 和金斯 (Jeans)^④，以经典电动力学理论为基础，并利用每种电磁波的振荡模式的平均能量为 $\frac{1}{2} kT$ 的能量均分定理，经推导后得到了瑞利 - 金斯公式

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

式中 k 为玻尔兹曼常量， c 为光速。与维恩公式正好相反，瑞利 - 金斯公式在低频段与实验吻合得很好，在高频段却与实验不符。由于上述两式正好互补，德国物理学家普朗克 (Planck) 以上述两式为基础，利用内插法得到了与实验完全吻合的普朗克公式 (1900 年 10 月 19 日在德国柏林物理学会上报告)

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

① W. Wien, Berl. Ber., (1893), 55.

② W. Wien, Wied. Ann., 52 (1894), 132; 58 (1896), 662.

③ L. Rayleigh, Phil. Mag., 49 (1900), 539; Nature, 72 (1905), 54, 243.

④ J. H. Jeans, Phil. Mag., 10 (1905), 91.

式中首次出现了一个常数 h ，称为普朗克常量，它后来成为判别宏观理论与微观理论的一个重要标志。

经典物理的困难在于对普朗克公式的解释。因为要从理论上得出该公式，就必须引进量子的概念。1900

年 12 月 14 日，Planck 又在柏林物理学

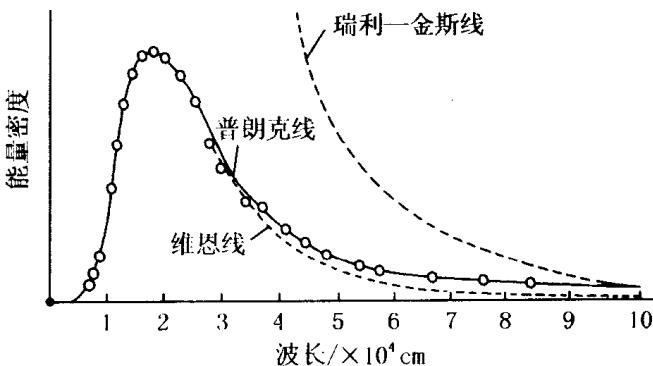


图 1-1 黑体辐射公式与实验对比图

会上给他的公式予以量子说明。普朗克假定^①，黑体以 $h\nu$ 为能量单位不连续地发射和吸收频率为 ν 的辐射。能量单位 $h\nu$ 称为能量子。基于能量子假设，Planck 推导了 (1-3) 式，从而引进了能量量子化的崭新概念，但与经典物理中电磁波能量连续的概念相抵触。可见，普朗克理论突破了经典物理学在微观领域的束缚，打开了认识光的粒子性的大门。1918 年 Planck 获诺贝尔物理学奖。

二、光电效应

光电效应是指光照射到金属上，使金属中的电子逸出而形成电流的现象。光电效应有两个显著的特点：一是具有所谓临界频率，即当照射光的频率小于某一个特定频率时，无论光强多强，照射时间多长，都没有电子逸出；二是逸出电子的能量仅与照射光的频率有关，而与光的强度无关，光的频率越高，光电子的能量就越大，光的强度只影响光电子的数目，光强越强，光电子数目越多。经典

① M. Planck, Ann. Physik, 4 (1901), 553.

物理也无法解释这两个特点。因为根据经典电磁波理论，光波连续地输送能量，而光电子则连续地吸收光波的能量，因此，光电子能量应决定于光强，所以，对任何频率的光照射，金属都会发生光电效应，这与实验事实不符。

为了解释光电效应，爱因斯坦（Einstein）从普朗克的辐射量子论出发，首次提出了光量子的概念^①，他认为辐射不仅在被吸收或发射时而且在传输时也是以量子的状态存在，即将光看成是由大量光量子（简称为光子）组成，每个光子的能量为 $h\nu$ ，即

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

式中 ν 为光波的频率， $\omega = 2\pi\nu$ ， $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ^②。光子在与电子的碰撞过程中将能量传递给电子。设电子的逸出功为 W_0 ，质量为 μ ，逸出后速度为 v_e ，则能量守恒式（光电效应方程）可表示为

$$h\nu - W_0 = \frac{1}{2}\mu v_e^2 \quad (1-5)$$

由此可得出临界频率为 $\nu_0 = \frac{W_0}{h}$ 。可见，利用光子的概念可以解释光电效应，反之，我们也可以说明光电效应体现了光的粒子性。1921 年 Einstein 因发现光电效应定律获诺贝尔物理学奖。

三、康普顿效应

美国物理学家康普顿^③ 在研究高频 X 射线被电子散射的实验中发现，散射光的波长随散射角而变化，这一现象称为康普顿（Compton）效应。由于在经典电磁波理论中，光经物质散射后的波长应是不变的，因而康普顿效应也无法用经典物理的理论来解释。按照 Einstein 假设，不再把光看为连续的电磁波，而看作是由大量

① A.Einstein, Ann., Physik, 17 (1905), 132.

② \hbar 称为约化 Planck 常数， $\hbar = 1.05457266 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

③ A.H.Compton, Phys.Rev., 21 (1923), 483; 22 (1923), 409.

光子所组成，则根据相对论，光子除具有能量 $h\nu$ 外，尚具有动量

$$\mathbf{p} = \frac{h\nu}{c}\mathbf{n} = \frac{h}{\lambda}\mathbf{n} = \hbar\mathbf{k} \quad (1-6)$$

式中 \mathbf{n} 为光子运动方向的单位矢量， λ 为光的波长，而

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

称为波矢。若假定光子与电子碰撞中能量守恒和动量守恒仍然成立，则可以非常好的解释康普顿效应^①。

以上三个问题，都是属于经典物理（实际是经典电磁波理论）所遇到的困难，解决困难的共同点就是电磁波的能量不再能够看作是连续的，而必须看成是能量量子化的。从这点上来说，上述三个问题都可以看作是体现了光的粒子性。另一方面我们也看到，在新的理论中，普朗克常数 h 起着关键的作用，即当 h 的作用可以略去时，经典理论是适用的，当 h 的作用不可忽略时，经典理论不再适用。因此，凡是 h 起重要作用的现象都称为量子现象。

最后需要指出的是，上述三个问题在物理意义上也并不是完全重复的。黑体辐射仅仅是证实了能量量子化；光电效应进一步证明了单个光子的能量为 $E = h\nu$ ；康普顿散射则证实了光子的动量为 $\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda}\mathbf{n}$ 。

§2 原子结构问题中的困难 玻尔的原子结构理论

经典物理的另一类困难来自于原子结构的问题。

一、原子结构问题中经典物理学的困难

经典物理在原子结构问题中所遇到的困难有两点：

^① 蔡建华，量子力学，北京：人民教育出版社，1980.20~21

①原子的稳定问题。

由于电子绕核的运动具有加速度，因而会有电磁波辐射，电子的能量应有损失，绕核运动的半径应该变小，最后将会跌落到原子核中，而实际上原子却是稳定的。

②谱线离散问题

经典理论中辐射出电磁波的频率应是连续的，但实际测得的原子辐射频率却是离散的。例如早在 1885 年，巴耳末 (Balmer)^① 已经发现由氢原子发出的光谱线的频率是离散的，其经验公式可写为

$$\nu = R_{\infty} c \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (2-1)$$

二、原子结构的玻尔理论

为了解释氢原子的辐射光谱，丹麦物理学家玻尔 (Bohr)^② 于 1913 年提出了有关原子结构的半经典理论（被称为玻尔理论），其要点如下：

①原子中存在特殊的轨道，电子沿轨道运动的角动量只能取离散值（量子化条件）

$$p_{\varphi} = nh \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2-2)$$

电子在这些轨道上运动时处于定态，将不会发射或吸收电磁波。

②电子在不同的特殊轨道间跃迁时，将会放出或吸收光子，光子的频率取决于原子初、末状态的能级差（频率条件）

$$\nu = \frac{|E_n - E_m|}{h} \quad (2-3)$$

式中 E_n, E_m 是不同特殊轨道对应的能量。

由上述玻尔理论可以推导出氢原子能级的表达式为

$$E_n = - \frac{\mu e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2-4)$$

① J.J.Balmer, Ann.Physik, 25 (1885), 80.

② N.Bohr, Phil.Mag., 26 (1913), 1, 471, 857.