

量子力学

LIANG ZI LI XUE

山东教育出版社

华东六省一市师范大学合编教材

量 子 力 学

樊锡君 曾民勇 郁渭铭
李鹤年 王贤德 邵金山 编

山东教育出版社
1988年·济南

内 容 提 要

本书简明地介绍了量子力学的基本原理和某些应用，内容包括导言及量子力学基础、量子效应、力学量的算符表示、微扰论、量子力学的矩阵形式和电子自旋、全同粒子体系、相对论量子力学概要等。本书物理概念明晰，数学推导简明，教材内容安排和处理方法有所更新，例题较多，每章配有难易适度的习题，并附有答案。

本书可作为高等师范院校及其他理工科大学非理论物理专业的理论物理课程的试用教材或教学参考书。

华东六省一市师范大学合编教材

量 子 力 学

樊锡君 曾民勇 郁渭铭 编
李鹤年 王贤德 邵金山 编

*

山东教育出版社出版
(济南经九路胜利大街)

山东省新华书店发行 山东新华印刷厂印刷

*

787×1092毫米32开本 10.5印张 220千字
1988年11月第1版 1988年11月第1次印刷
印数1—3,270

ISBN 7—5328—0427—5/0·8

定价 2.75 元

编写说明

本书是由华东地区七所师范大学（山东师大、南京师大、浙江师大、安徽师大、江西师大、福建师大、上海师大）物理系合编的《理论物理概论》中的一册。《理论物理概论》分为《理论力学》、《电动力学》、《量子力学》、《热力学和统计物理》四册，可作为高等师范院校及其他理工科大学非理论物理专业的理论物理课程的试用教材或教学参考书。

《量子力学》分册简明地介绍了量子力学的基本原理和重要应用。全书内容包括导言及量子力学基础、量子效应、力学量的算符表示、微扰论、量子力学的矩阵形式和电子自旋、全同粒子体系、相对论量子力学概要等七章。

本书的内容除去个别带“*”的节之外，可在近50个学时内讲授完毕，带“*”的节可作为选讲内容。 $*\S 2\cdot 4$ 和 $*\S 2\cdot 5$ 二节亦可放在第三章结束后选讲。

本书的导言、 $*\S 2\cdot 5$ 、第三章、附录Ⅱ、Ⅲ，由山东师大樊锡君执笔；第一章，由福建师大曾民勇执笔；第二章（除 $*\S 2\cdot 5$ ）、附录Ⅰ，由南京师大郁渭铭执笔；第四章、附录Ⅴ，由浙江师大李鹤年执笔；第五章、第七章、附录Ⅳ，由上海师大王贤德执笔；第六章、由江西师大邵金山执笔；主编，樊锡君。

苑之方教授审阅了书稿，在此谨致衷心的感谢。

由于编者水平有限，不妥之处难免，请读者批评指正。

编 者

1988.1

目 录

导言.....	1
第一章 量子力学基础.....	6
§1·1 德布罗意假设	6
§1·2 波函数	13
§1·3 态的叠加原理	24
§1·4 薛定谔方程	29
§1·5 海森伯测不准关系	39
小结.....	48
习题.....	50
第二章 量子效应.....	53
§2·1 零点能.....	53
§2·2 能量量子化	57
§2·3 隧道效应	70
*§2·4 阿哈朗诺夫-玻姆效应	81
*§2·5 量子霍耳效应	88
小结.....	97
习题.....	99
第三章 力学量的算符表示	102
§3·1 力学量的算符表示	102
§3·2 线性算符和厄米算符 算符的一般运算法则	108
§3·3 厄米算符的本征值和本征函数.....	115

§3·4 测不准关系的普遍形式 共同本征函数	128
§3·5 氢原子和类氢原子	138
*§3·6 力学量随时间的变化	149
小结	154
习题	157
第四章 微扰论	162
§4·1 非简并情形下的定态微扰论	163
§4·2 有简并情形下的定态微扰论	170
§4·3 与时间有关的微扰论	178
§4·4 光的吸收和发射	182
小结	191
习题	193
第五章 量子力学的矩阵形式和电子自旋	197
§5·1 波函数和力学量算符的矩阵表示	197
§5·2 量子力学公式的矩阵表示	207
§5·3 电子自旋	214
*§5·4 正常塞曼效应	224
小结	229
习题	232
第六章 全同粒子体系	237
§6·1 全同性原理 交换对称性	237
§6·2 两个全同粒子体系的波函数 泡利不相容原理	242
§6·3 氦原子 交换能	252
小结	263
习题	265
第七章 相对论量子力学	269

§7·1	克莱因-戈登方程	269
§7·2	自由粒子的狄拉克方程	271
*§7·3	电子在电磁场中运动的狄拉克方程	280
	小结	287
	习题	287
附录 I	厄米多项式	289
附录 II	δ 函数和连续谱本征函数的“归一化”.....	295
附录 III	氢原子的能级和波函数	299
*附录 IV	量子力学中的因式分解法.....	304
附录 V	爱因斯坦吸收系数和发射系数	324
附录 VI	物理常数和常用单位之间的换算关系	326

导　　言

从十八世纪起逐步形成的物理学经典理论体系（包括牛顿力学、热力学及统计物理学、电动力学），到十九世纪末已达到相当完善的程度。运用经典理论，人们可以成功地解释那时所常见的各种物理现象。但是，随着物理学的研究领域从宏观尺度逐渐向微观尺度^[1]的深入，十九世纪末和二十世纪初，人们陆续发现了一些用经典理论无法加以说明的新的实验事实，于是，不得不在经典理论的基础上加进一些假设以对这些新发现的实验事实做出解释，这就是旧量子论的阶段。

我们知道，所有物体都发射出热辐射，这种辐射是一定波长范围内的电磁波。然而经典电磁理论和统计物理学却不能对黑体辐射的能量分布给出正确的解释。1900年，普朗克提出了能量子假设：黑体由带电谐振子组成，其中频率为 ν 的振子，只能以 $h\nu$ 为单位不连续地发射和吸收辐射能量。单位能量 $h\nu$ 称为能量子， h 为普适常数（即后来所称的普朗克常数， $h=6.62559(16)\times 10^{-34}\text{J}\cdot\text{s}$ ）。根据这一假设导出的普朗克公式所得出的黑体辐射能量分布与实验结果惊人地相符。普朗克假设的伟大历史功绩就在于它首次揭示了微观世

[1] 我们把“微观”尺度定义为原子或亚原子现象的尺度，最多只有几埃的数量级。“宏观”尺度则定义为用肉眼或普通显微镜能观察到的现象的尺度，其最佳分辨率是1微米。

界的一个重要特点：能量的不连续性（量子化）。

1905年，针对光电效应的实验事实与经典观念的矛盾，爱因斯坦发展了普朗克假设，提出了光量子概念：电磁辐射不仅在被发射和吸收时以能量为 $\hbar\nu$ 的微粒形式出现，而且也用这种形式以速度 c 在空间运动，这种粒子叫做光量子或光子。光子的静止质量为零，但它具有动量和能量。也就是说，具有最小能量的实体是光子。以光量子概念为基础提出的爱因斯坦光电效应方程圆满地说明了光电效应的特点。后来，光的粒子性在康普顿-吴有训的散射实验（1923年）中得到了进一步的验证。另外，光的波动性早已被干涉、衍射现象所证实，这样光就具有波动和微粒的双重性质。利用狭义相对论给出的光子动量-能量关系 $E = p/c$ 和普朗克关系 $E = \hbar\nu$ ，光的这种波粒二象性还可以通过下面的爱因斯坦关系定量地联系在一起

$$\left. \begin{aligned} E &= \hbar\nu = \hbar\omega; \\ \vec{p} &= \frac{\hbar}{\lambda} \vec{n} = \hbar \vec{k}. \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

其中， E 、 \vec{p} 分别为光子的能量和动量， ω 、 \vec{k} 分别为光波的角频率和波矢量， $\hbar = h/2\pi = 1.05449(3) \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ 。

1913年，玻尔把普朗克-爱因斯坦的量子化概念用于卢瑟福的“原子有核模型”，提出了氢原子的玻尔理论。

(1) 定态条件：原子中的电子只能沿某些特定的圆形轨道绕核转动，且不产生电磁辐射。

(2) 频率条件：当电子从能量为 E_i 的定态(轨道)跃迁到能量为 E_n 的定态(轨道)时将吸收或发射频率为

$$\nu = \left| \frac{E_n - E_{n'}}{\hbar} \right| \quad (2)$$

的光。

(3) 角动量量子化：电子的角动量是 \hbar 的整数倍，即
 $L = n\hbar$ 。 ($n=1, 2, 3, \dots$) (3)

玻尔的定态条件解释了原子的稳定性。由量子化条件 (3) 则可导出氢原子量子化的定态能量

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

其中， μ 、 e 分别为电子的质量和电荷， ϵ_0 为真空中的介电常数。利用 (2) 和 (4) 式可得到与实验相一致的氢原子谱线结构。后来 (1916年)，索末菲又把玻尔的量子化条件推广到多自由度的情况。这样就不仅能解释氢原子 (以及类氢原子) 光谱，而且对于碱金属原子的光谱也能给出较好的解释。

普朗克-爱因斯坦假设及玻尔-索末菲的原子理论，构成了旧量子论的主要内容。由此可知，旧量子论关于光的二象性以及原子的定态、能量量子化和量子跃迁的概念无疑是对经典物理学的重大突破，这些概念的提出对后来物理学理论的发展起了巨大的推动作用。然而，不论在理论上还是对实际问题的处理上，旧量子论都存在着严重的缺陷和不足。例如，普朗克和玻尔的能量量子化和角动量量子化都带有人为的性质，而没有从根本上解决不连续性的实质；玻尔的理论不能说明谱线的强度和偏振现象，无法处理复杂原子 (如氦原子) 的光谱及非束缚态问题等。正是在对旧量子论的批判性的继承中产生了新量子论-量子力学。

量子力学主要是研究微观粒子运动规律的一种基础理论，用来描述那些微观尺度内的现象。1926年，由海森伯等人发展起来的矩阵力学和由薛定谔所创立的波动力学形成了量子力学的完全等价的两种数学表述方式^[1]。它们与玻恩对波函数的统计解释及海森伯的测不准关系一起，组成了非相对论性量子力学的严密体系。依照这个理论，不仅完美地解决了氢原子问题，而且能成功地解释氦原子及其他原子、分子现象。1928年，狄拉克把狭义相对论引入到量子论之中，这就成为相对论量子力学的基础。它能对自旋等现象给出正确的回答。这样，量子论的理论体系可以说基本上完成了。

但是，我们不能认为量子力学规律与宏观世界无关。事实上，量子力学的规律不仅支配着微观世界，而且也支配着宏观世界。有一些宏观现象，例如某些物质在极低温度下的超导现象^[2]和超流现象，木星和土星上绝大部分氢呈现为金属态等等，量子效应都很显著，要对它们做出正确的解释必须借助于量子理论。已被无数事实证明相当正确地描述了

[1] 1948年，费曼发表了本质上是量子力学第三种表述的理论，即量子力学的路径积分形式。参见R.P.Feynman, Rev.Mod.Phys., 20, 267 (1948)；
[美]R.P.费曼、A.R.希布斯著，张邦固等译，《量子力学与路径积分》，科学出版社，1986年第一版。

[2] 指1911年翁涅斯发现的很多金属在极低温度下电阻完全消失的现象。直到1957年，巴丁、库珀及施里弗才在理论上把超导的机制弄清楚（简称BCS理论）。BCS理论给超导体设了一个禁区：物质显示超导本领只能在绝对温度40K以下。但全世界的科学家多年来仍千方百计地寻找较高温度时具有超导性质的材料。这一努力在1986年有了突破性进展。联邦德国的约翰尼斯·柏诺兹博士和瑞士的卡尔·穆勒教授最先成功地发现了高临界温度（高T_c）超导材料，我国（到1987年初）已研制成临界温度为100K，零电阻温度为95K的超导材料和零电阻为60K的超导薄膜，从而跨入了世界先进行列。关于高T_c超导现象的理论解释尚在探讨之中。

宏观自然现象的经典力学规律，实质上不过是量子力学规律的一个近似，只能适用于量子效应不显著的情况。

现在，量子力学已被应用于小至基本粒子，大到中子星、黑洞的研究，取得了许多重大的成就。现代物理学的各个分支，如高能物理、固体物理、统计物理、核物理、天体物理、量子光学、量子声学、量子电子学等等，无不以它为理论基础。量子论的影响已越出传统的物理学领域，它渗透到化学和生物学等学科之中，形成量子化学、量子生物学等边缘学科。

由于波动力学使用的数学工具是人们较为熟悉的微分方程，对初学者较易掌握，而且量子力学的大多数基本应用都采用波动力学的形式，所以，我们将沿波动力学这一条线来讲述量子力学，而在第五章中简略地讨论量子力学的矩阵形式。最后（第七章）我们将对相对论量子力学仅作扼要的介绍。

应该指出的是，尽管量子力学理论的正确性已为大量实验事实所证明，但对量子力学理论的物理解释以及随之而来的科学哲学问题，却引起了一场激烈复杂的学术大辩论。考虑到这方面已有的结论不多，所以本书没有涉及这个问题。

第一章 量子力学基础

本章首先介绍微观粒子所具有的根本属性——波粒二象性，接着引入波函数的概念用以描述微观体系的状态，并着重讲述波函数的物理意义。然后，在介绍微观体系所满足的态的叠加原理的基础上，引进微观体系的动力学方程，即量子力学的基本方程——薛定谔方程。最后，简明扼要地介绍测不准关系及其应用。

§1·1 德布罗意假设

一、假设的提出

1923年9—10月，年轻的法国物理学家德布罗意在法国科学院会议周报上连续发表了三篇短文，1924年11月，他又向巴黎大学提交了“量子论的研究”这篇博士论文，详细地阐述了他的关于实物粒子具有波粒二象性的思想。德布罗意认为，“整个世纪以来，在光学上，比起波动的研究方法来，是过于忽略了粒子的研究方法；在物质理论上，是否发生了相反的错误呢？是不是我们把关于‘粒子’的图象想得太多，而过分忽略了波的图象？”他还注意到光学与力学之间存在着某种类比关系，并试图在物理学的这两个领域内建立起一个能同时适用于两者的理论。他认为，“如果要想建立起一个能同时解释光的性质与物质的性质的单一理论，那么在物质的理论中犹如在辐射理论中一样，必须同时考虑波和粒

子”。由此，德布罗意提出了如下的具有深远意义的假设：具有确定能量 E 和动量 \vec{p} 的自由粒子，相当于频率为 ν 和波长为 λ 的平面波，两者之间的关系为

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

$$\vec{p} = \frac{h}{\lambda} \vec{n} = \hbar\vec{k}. \quad (1 \cdot 1 - 2)$$

式中， $\omega = 2\pi\nu$ 表示角频率， $\vec{k} (= 2\pi/\lambda)$ 表示波矢， \vec{n} 为该粒子运动方向的单位矢量。

这种表示自由粒子的平面波称为 德布罗意波 或“物质波”，(1·1—1) 和 (1·1—2) 式称为德布罗意关系式。它与光子和光波之间的关系式（导言中公式 (1)）形式上是一样的。然而，光子的静止质量 $\mu_0 = 0$ ，光子的速度为 c ，而实物粒子的静止质量 $\mu_0 \neq 0$ ，其速度 $v < c$ ，所以对光子可以由 (1·1—1) 式利用相对论能量-动量关系导出 (1·1—2) 式，而对实物粒子却不能。因此可以说，德布罗意关系式是对爱因斯坦关系式的继承和发展。

(1·1—1) 和 (1·1—2) 式也使我们进一步认识到普朗克常数 h 的重要意义。当初普朗克引入这个常数是作为量子化的量度，用以表征不连续性（即分立性）的程度；现在这个常数又在波粒二象性之间起着桥梁作用，用以表征它们之间的关联程度。量子化和波粒二象性是量子力学中两个很基本的概念，而普朗克常数 h 在这两个概念中都起着关键的作用。在经典现象中，普朗克常数 h 和其他物理量相比可以略去，不再呈现量子力学的特征；反之，在量子现象中，普朗克常数 h 在其中起着重要的作用，在任何表达式中，只要有 h 出现，就意味着这一表达式具有量子力学的特征。

由上述可知，根据德布罗意关系式我们就可以求出任意实物粒子所相应的“物质波”的波长。例如，一个具有确定动量 p 和确定能量 E 的自由粒子，当它的运动速度远小于光速时，其动能为 $E = p^2/2\mu$ ，其中 μ 为粒子的质量。于是，由(1·1—2)式可得出相应的“物质波”的波长

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2\mu E}} \quad (1·1—3)$$

若将电子的有关数值代入此式，可得出与动能为 E 的自由电子相应的德布罗意波的波长

$$\lambda = \frac{\sqrt{150}}{\sqrt{E(\text{eV})}} \text{ \AA} \approx \frac{12.25}{\sqrt{E(\text{eV})}} \text{ \AA} \quad (1·1—4)$$

应该注意的是，此式仅对电子才成立，且只有当电子的动能用 eV (电子伏特)作为单位时， $1\text{eV} = 1.602102 \times 10^{-19}\text{J}$ (焦耳)。如果电子是被 V 伏特的电势差加速，那么电子的德布罗意波长

$$\lambda \approx \frac{12.25}{\sqrt{V}} \text{ \AA} \quad (1·1—5)$$

在通常情况下，电子的德布罗意波长是很短的。例如，用 150V 的电势差所加速的电子，其德布罗意波长为 1\AA ，而当 $V = 10^4\text{V}$ 时， $\lambda \approx 0.122\text{\AA}$ ，它们都在 X 射线的波长范围内，其数量级相当于 (或略小于) 晶体中的原子间距。

对于经典粒子，例如空气中的微尘，其直径约为 1 微米，质量约为 10^{-12} 克，以每秒 1 厘米的速度运动，它的德布罗意波长为 $6.6 \times 10^{-7} \text{ \AA}$ ，比微尘本身的直径小得多。尽管在这种情况下德布罗意关系式仍然适用，但其波动性并不显著，

事实上也是观察不到的，这时用经典力学的方法来处理是恰当的。然而，在微观世界中，微观粒子的波动性明显地表现出来，这时经典力学就无能为力了，必须用量子力学的方法来处理。

二、实验验证

德布罗意的假设是否正确，关键在于微观粒子的波动性是否能由实验得到验证，因为微观粒子的粒子性是早已被公认的。1923年，德布罗意曾指出“一束电子穿过非常小的孔可能产生衍射现象，这也许是从实验上验证我的想法的方向。”1924年，在博士论文答辩会上，他又建议用电子在晶体上做衍射实验。但由于当时德布罗意的假设并没有受到物理学界的重视，所以也没有人争取做这方面的实验。后来，由于德布罗意的导师朗之万(Langevin)的推荐，爱因斯坦注意到德布罗意的思想，并指出了它的重要性和恰当性，从而才引起了其他物理学家的注意。

1925年，美国的戴维逊和革末在做电子在镍(Ni)中的散射实验时，一次偶然的事故使镍被氧化了。为使其还原，他们采取了对镍进行加热处理的方法，结果使镍形成了单晶结构，从而第一次得到了电子在晶体表面上的衍射图样。他们的实验装置如图1·1—1(a)所示。在加速电压 V 的作用下，电子枪发射电子束并垂直地投射在一块镍单晶上，移动电子探测器就可以记录下各个不同散射角 θ 方向上散射电子束的强度。他们发现，散射电子束的强度随散射角 θ 而改变，当 θ 取某些确定值时，散射电子束的强度有最大值，如图1·1—1(b)所示，这现象与X射线衍射现象相同。由于衍射现象是最典型的波动现象，所以充分说明了电子具有波动性。1927年，在他们

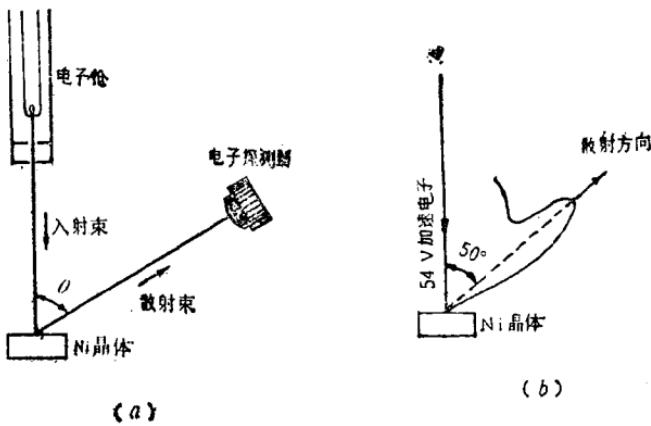


图1·1-1 电子在晶体Ni表面上的衍射实验示意图

知道德布罗意假设之后，又精确地进行了这个实验^[1]以定量地判断德布罗意关系是否正确。根据衍射理论，衍射极大值由公式 $n\lambda = d \sin \theta$ 确定，其中， n 是衍射极大值的序数， λ 是射线的波长， d 是晶体平面栅常数， θ 是衍射角，即上述的散射角。他们利用这个公式计算电子的德布罗意波长后，得到与(1·1-2)式相一致的结果，从而证明了德布罗意公式对于电子是正确的。

接着，汤姆逊、塔尔塔科夫斯基分别用快速和慢速电子通过具有多晶体结构的薄层（为了避免电子被强烈地吸收，这层要很薄，大约为 10^{-5} 厘米），也获得了电子衍射图样^[2]。1961年，约恩逊又成功地做了电子单缝衍射、双缝干涉等实验^[3]。他以高超的实验技术，利用特殊工艺在薄金属片上

[1] G.J.Davisson and L.H.Germer, *Phys.Rev.*, 30,705(1927)

[2] 史包尔斯基《原子物理学》第一卷§140

[3] C.Jönsson, *Z.Physik*, 161,454(1961); 或C.Jönsson, *Am.J.Phys*, 42, 4 (1974)