

高等学校交流讲义

量子力学基础

杨惠风 编

首都大学物理系

(一九八四年)

高等学校交流讲义

量子力学基础

杨惠风 编



清华大学物理系

(一九八四年)

目 录

前言

第一章 绪论

1. 量子力学的研究对象
2. 量子力学的发展简况
3. 量子力学的作用
4. 量子效应的判据

习 题

第二章 波函数和波动方程

1. 波函数
2. 态迭加原理
3. 薛定谔方程
4. 几率流密度
5. 定态薛定谔方程
6. 测不准关系
7. 一维无限深势阱
8. 一维谐振子
9. 势垒问题

习 题

第三章 量子力学中的力学量

1. 算符的基本性质
2. 表示力学量的算符
3. 力学量算符的本征值和本征函数
4. 算符和力学量的关系

5、不同力学量同时有确定值的条件

6、力学量平均值随时间的变化

7、电子在库仑场中的运动

8、氢原子

习 题

第四章 微扰理论

1、无简并的定态微扰论

2、基态氦原子的能级

* 3、有简并的定态微扰论

* 4、氢原子的一级斯塔克效应

5、含时间的微扰理论

6、跃迁几率

7、选择定则

习 题

第四章 自旋

1、电子的自旋

2、电子的自旋算符和自旋函数

* 3、两个角动量的相加

4、光谱的精细结构

习 题

第六章 多体问题

1、全同粒子的特性

2、玻色子和费米子

3、全同粒子体系的波函数 泡利原理

习 题

附录

附录 1、厄米方程的解

附录 2、 δ 函数

附录 3、动量算符的本征函数的归一化

附录 4、电子在库仑场中的径向波函数

附录 5、氢原子基态能量的修正值

附录 6、 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ 的矩阵表示

附录 7、碱金属原子光谱的双线结构

注：正文中带“*”号的部分为选讲内容

习题中带“*”号的部分为选作题

高等学校交流讲义

量子力学基础

杨惠风 编

首都大学物理系

(一九八四年)

目 录

前言

第一章 绪论

1. 量子力学的研究对象
2. 量子力学的发展简况
3. 量子力学的作用
4. 量子效应的判据

习 题

第二章 波函数和波动方程

1. 波函数
2. 态迭加原理
3. 薛定谔方程
4. 几率流密度
5. 定态薛定谔方程
6. 测不准关系
7. 一维无限深势阱
8. 一维谐振子
9. 势垒问题

习 题

第三章 量子力学中的力学量

1. 算符的基本性质
2. 表示力学量的算符
3. 力学量算符的本征值和本征函数
4. 算符和力学量的关系

5、不同力学量同时有确定值的条件

6、力学量平均值随时间的变化

7、电子在库仑场中的运动

8、氢原子

习 题

第四章 微扰理论

1、无简并的定态微扰论

2、基态氦原子的能级

* 3、有简并的定态微扰论

* 4、氢原子的一级斯塔克效应

5、含时间的微扰理论

6、跃迁几率

7、选择定则

习 题

第四章 自旋

1、电子的自旋

2、电子的自旋算符和自旋函数

* 3、两个角动量的相加

4、光谱的精细结构

习 题

第六章 多体问题

1、全同粒子的特性

2、玻色子和费米子

3、全同粒子体系的波函数 泡利原理

习 题

附录

附录 1、厄米方程的解

附录 2、 δ 函数

附录 3、动量算符的本征函数的归一化

附录 4、电子在库仑场中的径向波函数

附录 5、氢原子基态能量的修正值

附录 6、 $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y$ 的矩阵表示

附录 7、碱金属原子光谱的双线结构

注：正文中带“*”号的部分为选讲内容

习题中带“*”号的部分为选作题

前 言

理论物理学是物理专业的基础理论课。对于将来从事中等学校的物理教学的教师来说。是必须具备的基本理论知识。因此。它不仅是师范物理系的必修课。也在师范物理专业的教学中。占有一定的位置。对于师范物理专业来说。设置量子力学课程的目的主要是：

1. 使同学们了解微观粒子的运动规律。初步掌握量子力学的基本原理和基本方法。培养同学们具有一定的抽象思维、逻辑推理和数学表达的能力。为进一步学习较高深的知识打下必要的基础。并在今后从事中等学校的物理教学中。能有居高临下、深入浅出地处理问题的能力。

2. 使同学们了解量子力学在近代物理学中的广泛应用。深化和扩大在普通物理中学过的有关内容。以适应今后中等学校物理教学的需要。

但目前出版的《量子力学》书籍。对于师范物理专业来说。其内容是偏深偏多的。因此。我们参照高等教育出版社在1983年8月印刷的“三年制师范专科学校《理论物理概论》教学大纲”编此讲义。供本校物理专科学同学们使用。本讲义的内容。比一般的《量子力学》书籍要少。其深度亦较浅。但其基本方法和基本原理却是一样的。故称之为《量子力学基础》。本讲义的特点是突出物理概念。正文中省略了复杂的数学运算。请同学们在使用过程中提出意见。以便再编时改进。

本讲义在编写过程中。曾与怀化师范一匡同志进行了讨论。承蒙提出许多宝贵意见。谨表示深切的谢意。

编者

一九八四年五月

第一章 绪 论

在这一章中，我们首先阐述量子力学的研究对象，然后简要地介绍一下量子力学的发展历史及其在近代物理学和现代科学技术中的广泛应用，最后讨论量子效应的判据。

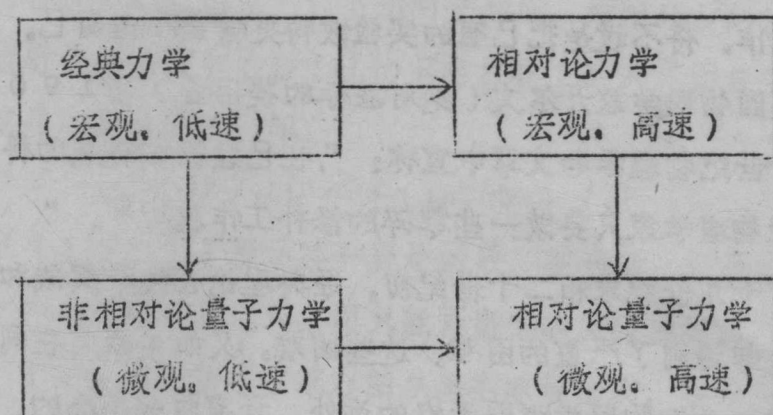
§ 1. 量子力学的研究对象

量子力学是物理学的一部分，物理学是研究物质各种基本的、普遍的运动规律的科学。

我们知道，物质有宏观和微观之分。运动有高速和低速之分。宏观物质是由大量的分子、原子所构成的物体。微观物质是指单个的分子、原子、原子核、基本粒子等。速度的高低是相对于光速而言的，当物体的运动速度接近于光速时，则该速度称为高速；当物体的运动速度远小于光速时，则该速度称为低速。

经典力学所研究的是，宏观物体在低速运动时的规律。相对论力学所研究的是，宏观物体在高速运动时的规律。运用相对论原理的量子力学，叫做相对论量子力学。不考虑相对论原理的量子力学，叫做非相对论量子力学。这就是说，非相对论量子力学的研究对象是速度远小于光速的微观粒子，而相对论量子力学的研究对象是高速运动的微观粒子。

经典力学、相对论力学和量子力学三者之间的关系，用方框图表示如下：



§2. 量子力学的发展简况

量子力学是近代物理学的重要基础理论之一，它同其他科学理论一样，不是凭空捏造的，而是由于当时生产力的不断发展，科学技术的突飞猛进，人们对客观世界认识的不断深入而产生的，同时也是自然科学本身发展的必然结果。

从十八世纪起，由于生产力的推动和社会上的需要，物理学有了极其迅速的发展，同时还分别形成了许多分支。在力、热、声、光、电等方面，都发现了许多定律，逐步形成了一个比较完整的经典理论体系。人们运用这些经典理论，成功地解释了各种物理现象，解决了生产中的不少实际问题。这种状况，一直延续到十九世纪八十年代，经典物理学几乎没有遇到什么重大的难题，发展得非常顺利，达到了它全盛的“黄金时代”，建立了完整的三大理论体系：机械运动（包括声波，它是弹性媒质中的机械波）服从牛顿力学；热运动服从热力学和经典统计物理；电磁场运动（包括光波，电磁波被认为是以太媒质中的波动）服从麦克斯韦经典电动力学。

面对这些成就，在大部分物理学家的眼光里，认为物质世界的运动已经构成了一幅清晰的画面，基本问题都研究清楚了，留给下

一代人所做的工作，将不过是把已有的实验做得更精确一些而已。这正如著名的英国物理学家开尔文（绝对温标的提出者）在1900年一篇瞻望二十世纪物理学的文章中宣称：“在已经基本建成的科学大厦中，后辈物理学家只要做一些零碎的修补工作就行了。”

但是，到了十九世纪末和二十世纪初，经典理论在生产实践和科学实验面前，却遇到了严重的困难。这些困难，又如开尔文在同一篇文章中所说：“在物理学晴朗天空的远处，还有两朵小小的、令人不安的乌云”。这两朵乌云就是指当时物理学无法解释的两个实验，其中一个为迈克耳逊——莫雷实验，另一个是黑体辐射实验。前者否定了“以太风”的存在，后者冲击了经典物理学中最基本的概念，导致了量子论的诞生。很有趣味的是，这两朵乌云都与电磁波的本性有关。

黑体辐射实验所研究的是，辐射与周围物体处于平衡状态时的能量按频率（或波长）分布。我们知道，所有物体都能向外界辐射电磁波。在一定温度下，物体发出的这种电磁波，我们称为热辐射。处于不同温度下的物体，各自向外辐射能量，也各自吸收和反射外来的能量，这样就产生了能量的交换。显然，辐射、吸收和反射能量的本领，对不同温度下的不同物体是不相同的。当一个物体辐射出去的能量，等于它吸收外来的能量时，这个物体就处于热平衡状态。如果一个物体能百分之百地吸收投射在它上面的辐射，则这个物体就被称为绝对黑体（简称黑体）。一个空腔可以看作是黑体。

在一定温度下，空腔内部各种频率的电磁波都有，各种频率的波又沿着各个方向传播，每单位体积内频率从 ν 到 $\nu+d\nu$ 的电磁波能量记为 $\rho(\nu)d\nu$ 。实验结果表明，当空腔壁与空腔内部的

辐射在某一绝对温度 T 下达到平衡时，频率在 ν 到 $\nu + d\nu$ 之间的辐射能量密度 $\rho(\nu)d\nu$ 只与 ν 和 T 有关，而与空腔的形状及其本身的性质无关。即

$$\rho(\nu)d\nu = f(\nu, T)d\nu \quad (1-1)$$

式中 $f(\nu, T)$ 表示某一普适函数。在当时，还不能写出 $f(\nu, T)$ 的具体数学表达式，而只能画出它的实验曲线。

于是，理论物理学家力图从基本原理出发，推导出符合实验的、具体的能谱分布公式。维恩在作了一些特殊的假定之后，曾用热力学的方法，导出了下面的公式

$$\rho(\nu)d\nu = c_1 \nu^3 e^{-\frac{c_2 \nu}{T}} d\nu \quad (1-2)$$

式中 C_1 和 C_2 是两个常数。将维恩公式 (1-2) 与实验结果比较，发现两者在高频区域虽然符合，但在低频区域却相差很大。

瑞利和琼斯两人，假定空腔内的电磁波形成一切可能的驻波，运用经典统计理论，也导出了一个公式。即

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT d\nu \quad (1-3)$$

式中 C 是光速， k 是玻尔兹曼常数。把这个公式 (1-3) 与实验结果比较，发现两者在低频区域符合得相当好，但在高频区域却偏离很大。特别严重的是：如果用 (1-3) 式来计算所有频率的辐射能量密度，则得到

$$u = \int_0^{\infty} \rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \int_0^{\infty} \nu^2 d\nu = \infty$$

这就是说，物体在任何温度下，都不可能与电磁辐射达到能量上的平衡。当时，这种情况被称为“紫外线灾难”。由于瑞利——琼斯公式是严格地按照经典理论计算而得到的，因此，它在解释黑体辐射实验上的失败，表明了经典理论遇到了严重的困难。

1900年10月，普朗克利用当时库尔鲍姆、鲁本斯等人的实验测定数据，在维恩和瑞利——琼斯两个公式之间，通过内插法，凑出一个公式：

$$P(\nu)d\nu = \frac{C_1 \nu^3}{e^{\frac{C_2 \nu}{T}} - 1} d\nu \quad (-4)$$

式中 C_1 和 C_2 是两个常数。在辐射频率很高时，上式分母中的1可以略去，于是得到维恩公式。在辐射频率很低时， $\frac{C_2 \nu}{T} \ll 1$ ，这时通过级数展开，可得

$$e^{\frac{C_2 \nu}{T}} = 1 + \frac{C_2 \nu}{T} + \dots$$

如果只取展开式的前两项，在适当地选择常数 C_1 和 C_2 后，就得到瑞利——琼斯公式。

普朗克在提出他的内插公式后，立即转向从理论上去推导这个辐射公式的工作。普朗克注意到：在过去的理论中，空腔器壁上的分子、原子，被看作是吸收或发射电磁波的“振子”，在能量上可以连续变化。这就是说，电磁波和振子之间的能量交换，可以无限制地减小或增大，这一假定直接导致出现“紫外线灾难”的瑞利——琼斯公式。普朗克坚信，解决黑体辐射问题的关键在于弄清这些振子吸收和发射电磁波的规律，于是他决定放弃经典的能量均分

原理。大胆地假定振子的能量不可以连续变化，即振子只能处于某些特定的状态上。在这些状态中，它的能量是最小能量的整数倍。即

$$E_n = n\varepsilon_0 \quad (n \text{ 是正整数})$$

振子在吸收和发射电磁波时，只能从其中的某一个特定的状态，过渡到另一个特定的状态，并且最小能量 ε_0 与振子的振动频率 ν 成正比。即

$$\varepsilon_0 = h\nu \quad (1-5)$$

式中的 h 称为普朗克常数， $h\nu$ 称为频率是 ν 的能量子。在拉丁文里，量子的意思是“分立的部分”或“数量”

在能量量子化概念提出之前，人们已经熟悉质量和电荷的量子化。即在物质结构的原子学说确定后，质量量子化了；在发现电子后，电荷量子化了。

根据上述能量子的假设，运用经典统计理论和电磁理论，在1900年12月14日，普朗克提出了他的黑体辐射公式

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu \quad (1-6)$$

这个从理论上推导出来的公式与用内插法凑出来的公式完全一致。

普朗克常数 h 的测定值为

$$h = 6.626176 \times 10^{-34} \text{ 焦耳} \cdot \text{秒} \quad (1-7)$$

普朗克的上述假设与经典物理学的概念是根本对立的。在经典物理学中，物体的能量是可以连续取值的。而普朗克的假设，却认为振子能量只能取一些分立的值。但是，普朗克公式与实验结果的惊人符合，充分说明了它的正确性。它第一次揭示了微观物体与宏观物体有着根本不同的性质。

普朗克的假设，说明物体是以 $h\nu$ 为能量单位来发射或吸收能量的。也就是说，辐射在与物体发生相互作用（发射或吸收）时，不是连续进行的，而是以能量为 $h\nu$ 的颗粒形式出现的。能量小于 $h\nu$ 的发射或吸收过程是不存在的。

普朗克的量子假设，虽然成功地解释了黑体辐射的规律。但毕竟是间接的，物体究竟是否确是如此发射和吸收电磁波呢？还有待于进一步的证实。

第一个肯定光具有粒子性的是爱因斯坦，他在 1905 年提出的光量子理论比普朗克的能量子理论更前进了一步。普朗克只指出：辐射在与物体发生相互作用时，是以能量子的形式出现的，而辐射本身仍然是连续的电磁波。爱因斯坦则进一步指出：电磁辐射——光，不仅在发射或吸收时，以能量子为单位，而且它本身就是真空中以光速 c 运动着的粒子流，这些粒子叫作光量子，简称光子。这样，空腔内处于平衡态的“辐射”，可以看作是处于热平衡态的一种“光子气”。无数光子作着杂乱无章的热运动，由这种观念出发，利用玻色——爱因斯坦的量子统计，可以很顺利地推出普朗克公式。

频率为 ν 的光子，不仅具有能量 E ：

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (1-8)$$

（式中 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ ， ω 是角频率），而且具有动量 P ：

$$P = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (1-9)$$

应用爱因斯坦的光子假设，能够圆满地解释光电效应：电子所以能逸出金属表面，是由于金属中的自由电子吸收了一个能量为 $h\nu$ 的