理论物理导论

（修订版）

李　卫　[redacted]　编著

北京理工大学出版社

内 容 简 介

本书为电子部“九五”规划教材，在1994年版基础上修订而成。内容包括：经典力学，量子力学，热力学与统计物理，固体物理的基本概念和基础知识（如能带论、晶格振动、固体比热等），则以理论应用的形式溶入各部分之中，为工科院校的本科生提供一本较为适用的理论物理教材，内容简明扼要，易于接受，便于自学。

本书可作为高校工科电子类微电子技术专业教材，亦可供电子元件与材料专业、激光专业及有关工程技术人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

理论物理导论/李卫，刘义荣编著. —2版(修订版)：—北京：北京理工大学出版社，1998.9

ISBN 7-81045-458-7

Ⅰ.理… Ⅱ.①李… ②刘… Ⅲ.理论物理学-教材 Ⅳ.O41

中国版本图书馆CIP数据核字(98)第15509号

责任印制：刘京凤　责任校对：陈玉梅

北京理工大学出版社出版发行

(北京市海淀区白石桥路7号)

邮政编码100081　电话(010)68912824

各地新华书店经售

北京房山先锋印刷厂印刷

*

850毫米×1168毫米　32开本　14.375印张　368千字

1998年9月第1版　1998年9月第1次印刷

印数：1-2500册　定价：22.50元

出版说明

为做好全国电子信息类专业“九五”教材的规划和出版工作，根据国家教委《关于“九五”期间普通高等教育教材建设与改革的意见》和《普通高等教育“九五”国家级重点教材立项、管理办法》，我们组织各有关高等学校、中等专业学校、出版社，各专业教学指导委员会，在总结前四轮规划教材编审、出版工作的基础上，根据当代电子信息科学技术的发展和面向21世纪教学内容和课程体系改革的要求，编制了《1996—2000年全国电子信息类专业教材编审出版规划》。

本轮规划教材是由个人申报，经各学校、出版社推荐，由各专业教学指导委员会评选，并由我部教材办与各专指委、出版社协商后，审核确定的。本轮规划教材的编制，注意了将教学改革力度较大、有创新精神、特色风格的教材和质量较高、教学适用性较好、需要修订的教材以及教学急需、尚无正式教材的选题优先列入规划。在重点规划本科、专科和中专教材的同时，选择了一批对学科发展具有重要意义，反映学科前沿的选修课、研究生课教材列入规划，以适应高层次专门人才培养的需要。

限于我们的水平和经验，这批教材的编审、出版工作还可能存在不少缺点和不足，希望使用教材的学校、教师、同学和广大读者积极提出批评和建议，以不断提高教材的编写、出版质量，共同为电子信息类专业教材建设服务。

电子工业部教材办公室

前　　言

本教材系按电子工业部的《1996—2000年全国电子信息类专业教材编审出版规划》,由微电子技术专业教学指导委员会编审、推荐出版。本教材由北京理工大学李卫、刘义荣合编,主审为清华大学王天爵教授,责任编委为清华大学顾祖毅教授。

本教材的参考学时数为72学时,其主要内容为三部分:量子力学;热力学和统计物理;另有一章介绍拉格朗日方程和哈密顿方程,提供教材自身需要的基础知识。在各部分介绍的基本理论中,以理论应用的形式溶入若干固体物理的内容,如量子力学部分的能带论;统计物理部分的晶格振动与固体比热等。编写的出发点是为工科需要物理基础较多的各专业提供一本比较紧凑的中级理论物理教材,利用有限的学时为专业课程的学习做好铺路工作。在编写上,起点为工科本科普通物理和高等数学,在本科二年级开设本课程即可与专业课直接衔接。一些需要补充的数学内容,以附录的形式列于有关各章之后,可供讲授、自学或参考。

使用本教材时注意,凡标题上加*号者均为选学内容,是否列入课堂讲授计划由教师掌握。附录中除介绍在本课程开设之前,学生尚未接触过的数学内容之外,也有部分属复习性质,如全微分与线积分,排列、组合等;另有一部分是一些较长的数学计算,是为保持在对问题的阐述过程中,不致因长篇计算而导致思路中断,而列入附录中的,但这些内容并非全属累赘,原则上仍属选学内容,或在教师指导下由学生自学,可根据实际需要而定。

本教材是在1994年版的基础上修订而成,主要是在内容的介绍方法上,在概念的引入和阐述的深入浅出上,做了较多的改写,使之简明扼要,易于接受,便于自学。基本框架未做变动。

本教材由刘义荣编写量子力学部分;李卫编写第一章及热力学、统计物理部分。对于为本书的编写提供许多帮助的同志,在此表示诚挚的感谢。由于编者水平有限,书中难免还存在一些缺点和错误,殷切希望广大读者批评指正。

编　　者

1997 年 12 月

目　　录

第一章 拉格朗日方程与哈密顿方程

我们熟知牛顿运动定律，$m\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)=\boldsymbol{F}$。但牛顿力学还有其他表达方式，继牛顿(I. Newton 1643—1727)之后的一个世纪里，经过像拉格朗日(J. L. Lagrange 1736—1813)、哈密顿(W. R. Hamilton 1805—1865)等多人的努力，在牛顿所创建的基础之上建立了"分析力学"体系。时至今日，尽管相对论和量子力学的问世对牛顿力学给予了带根本性的冲击，但在一定的范围内，牛顿力学仍有其不可取代的地位。为了后续学习上的需要，本章将介绍分析力学中的两部分重要内容——拉格朗日函数与拉格朗日方程及哈密顿函数与哈密顿方程，并应用拉格朗日方程讨论多粒子系统的小振动问题，这能为分析晶格振动提供一个简明有力的方法，而了解晶格振动对研究固体物理问题来说是不可或缺的。在量子力学部分，可以看到本章中所介绍的哈密顿函数这样的力学量将以一种新的形式——算符的形式出现在量子力学的基本方程——薛定谔方程之中。

§1-1 自由度 约束与广义坐标

为了确定一个质点在空间的位置，常需要三个坐标 x、y、z。假如质点是完全自由的，即 x、y、z 彼此独立，则可称该质点有三个自由度。但常有这样的情形，质点限制在某一特定的轨道上动运，则 x、y、z 三变量之间存在着一定的关联，而并非彼此独立。例如，限制质点在平面上运动，由一般的平面方程 $Ax+By+Cz+D=$

0，可见质点的位置坐标 x、y、z 已不可能彼此完全无关，独立地确定了 x、y，则 z 就确定了。所以该质点的自由度就只剩下两个，该平面方程即称为“约束方程”。不难想象，如限制质点只在一条直线上运动，设想这条直线为二平面之交线，即此直线由 $A_1x+B_1y+C_1z+D_1=0$ 及 $A_2x+B_2y+C_2z+D_2=0$ 联立确定，则约束方程现在是两个，可供独立选择的坐标变量只剩下一个，于是该质点的自由度即为 1。一般说来，由 N 个质点组成的系统，如果各个质点彼此无影响，每个质点均不受任何约束，则此系统由 $3N$ 个独立坐标来描述；如果有形式为 $f_i(x_1,y_1,z_1,\cdots,x_{3N},y_{3N},z_{3N})=0(i=1,2,\cdots,k)$ 的 k 个约束方程，则此系统只需 $3N-k$ 个独立坐标来描述，称此系统具有 $3N-k$ 个自由度。为单值地确定一个系统的位置所必需给定的独立变量的数目，叫作这个系统的“自由度”数。这些独立变量不一定非是笛卡儿直角坐标不可，根据问题的具体情况，选择某种其他的坐标可能更合适。例如研究单摆，用摆球偏离铅直方向的角度 θ 来表示摆球的位置就足够了，又如研究除彼此相互吸引的作用外，无其他作用力的二质点系统的运动，利用球面坐标更为方便(后面有专门一节来讨论)。所以，为了方便，用足够描述有 s 个自由度的系统位置的 s 个变量用 q_1、q_2、q_3、$\cdots$、q_s 来表示，称为该系统的 s 个广义坐标，广义坐标对时间 t 的微商，$\mathrm{d}q/\mathrm{d}t$，记以 $\dot{q}$，称为广义速度。以后即采用如下的规定，在量的符号 x 的上方加一个点，$\dot{x}$，代表 x 对 t 的一次导数，加两个点，$\ddot{x}$，代表 x 对 t 的二次导数。

§1-2　拉格朗日方程

应用牛顿运动定律解力学问题时，首先需要知道物体所受的力，由此建立起运动方程，再由求解运动微分方程而得到物体运动的规律。但在有约束存在的情况下，应用这套方法会有一定的困

难，因为我们只有知道了作用于物体上的所有的力才能建立运动方程，而所有的力也应当包括约束作用于物体上的力在内，但这往往是不能预先知道的，于是就不能不把表示约束条件的方程式与描述运动的方程式联立求解，结果是研究的系统越复杂，求解越难。拉格朗日所提出的路线是不涉及矢量性质的力，而引用纯量性质的动能与势能来描述运动，这样写出的方程是关于整个力学系统的，无需对系统中的每一个质点单独去列运动方程，这样也就避免了约束作用所造成的困难。

1. 用拉格朗日函数表示牛顿运动方程

设有由 N 个质点构成的质点系，其第 i 个质点的三个直角坐标为 x_i、y_i、z_i，质量为 m_i，则 N 个质点的牛顿运动方程为

$$m_i \ddot{x}_i = X_i,\ m_i \ddot{y}_i = Y_i,\ m_i \ddot{z}_i = Z_i,\ (i = 1.2,\cdots,N) \quad (1\text{-}1)$$

式中 $\ddot{x}_i$、$\ddot{y}_i$、$\ddot{z}_i$ 代表第 i 个质点的加速度在 x、y、z 三个方向上的分量，X_i、Y_i、Z_i 则代表作用于该质点的力的三个分量，对于每一个质点都有类似的方程，所以含有 N 个质点的该力学系统应有 $3N$ 个这样的方程来描述其运动。

定义用直角坐标表示的质点系的动能 T 为

$$\begin{aligned} T &= \frac{1}{2}m_1(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{z}_1^2) + \cdots + \frac{1}{2}m_N(\dot{x}_N^2 + \dot{y}_N^2 + \dot{z}_N^2) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m(\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2) \end{aligned} \quad (1\text{-}2)$$

同时，如果我们讨论的是所谓“保守力系”①，则可以引入一个势函

① 此处，保守力系即指此力学系统中的力所作之功，仅与起末位置有关，而与具体的途径无关。具有此性质的力场，一定可以引入一位置函数 $U(x、y、z)$，而此力所作之功为

$$F_x\mathrm{d}x + F_y\mathrm{d}y + F_z\mathrm{d}z = -\mathrm{d}U \quad (a)$$

按功与途经无关的性质，$\mathrm{d}U$ 应为一全微分

$$\mathrm{d}U = \frac{\partial U}{\partial x}\mathrm{d}x + \frac{\partial U}{\partial y}\mathrm{d}y + \frac{\partial U}{\partial z}\mathrm{d}z \quad (b)$$

(a)、(b)二式相比较，可得关系式(1-3)。

数 $U(x、y、z)$，而有

$$X_i=-\frac{\partial U}{\partial x_i},Y_i=-\frac{\partial U}{\partial y_i},Z_i=-\frac{\partial U}{\partial z_i},(i=1,2,3,\cdots,N) \quad (1\text{-}3)$$

成立。在把静电场中电场强度表示为电势梯度的负值的关系中，我们曾经遇到过这种表示方法。

由(1-2)式可得

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}=\frac{1}{2}m_i\times 2\dot{x}_i=m_i\dot{x}_i$$

由此得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}\right)=\frac{\mathrm{d}(m_i\dot{x}_i)}{\mathrm{d}t}=m_i\frac{\mathrm{d}(\dot{x}_i)}{\mathrm{d}t}=m_i\ddot{x}_i$$

而 $m_i\ddot{x}_i$，由(1-1)式，正等于 X_i，于是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}\right)=X_i$$

再结合(1-3)式，得到

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}+\frac{\partial U}{\partial x_i}=0 \quad (1\text{-}4)$$

同样可以写出其余两个分量的式子

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{y}_i}+\frac{\partial U}{\partial y_i}=0 \quad (1\text{-}4)'$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{z}_i}+\frac{\partial U}{\partial z_i}=0 \quad (1\text{-}4)''$$

引入拉格朗日函数(以后简称拉氏函数)L，定义为

$$\begin{aligned}L&=L(x_1,y_1,z_1,\cdots,x_N,y_N,z_N,\dot{x}_1,\dot{y}_1,\dot{z}_1,\cdots,\dot{x}_N,\dot{y}_N,\dot{z}_N)\\&=T-U \quad (1\text{-}5)\end{aligned}$$

由于动能 T 只是速度 $\dot{x}_1,\cdots,\dot{z}_N$ 的函数，而 U 又限于只是坐标 $x_1,\cdots,z_N$ 的函数，因此在引入 L 之后，式(1-4)、(1-4)′、(1-4)″可以写成

$$\left.\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}-\frac{\partial L}{\partial x_i}=0\\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_i}-\frac{\partial L}{\partial y_i}=0\\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{z}_i}-\frac{\partial L}{\partial z_i}=0\end{aligned}\right\} \quad (i=1,2,\cdots,N) \tag{1-6}$$

(1-6)式即用拉氏函数表示的牛顿运动定律的形式.

2. 拉格朗日方程

方程式(1-6)就是用直角坐标 x、y、z 表示的拉氏方程。可以证明,用广义坐标表示的一般形式的拉氏方程与(1-6)式形式一样,只是把 x、y、z 换成 q_1、q_2、…,如下式所示

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}-\frac{\partial L}{\partial q_j}=0 \quad (j=1,2,\cdots,s) \tag{1-7}$$

(1-7)式即是描述具有 s 个自由度的系统的拉氏方程。对于有 s 个自由度的系统的 s 个广义坐标,对其每一个写出其拉氏方程,共得到 s 个方程式,它们可以代替牛顿运动定律来求解系统的运动方程。式中 L 是由系统的动能和势能定义的一个函数,$L=T-U=L(q,\dot{q})$,T 是系统的总动能,U 则代表势函数,$-\partial U/\partial q$ 代表广义力。

可以看出,用拉氏方程处理问题时,只需要与系统的自由度数一样多的方程式就够了。如果想要得到完全确定的解,还必须给出各 q 和 $\dot{q}$的初始值,这相当于确定拉氏方程的积分常数。

得到拉氏方程的途径不止一个。通过坐标变换从牛顿运动定律导出用广义坐标表示的拉氏方程将在本章附录 I 中介绍。

* §1-3 小振动问题

对于最简单形式的小振动问题,如一维振子的简谐振动和单

摆等，我们已比较熟悉。现在要讨论的是多粒子系统的小振动问题。这里所说的多粒子系统，是指各粒子并非彼此独立，而是在它们之间存在着相互作用的系统。粒子间的相互作用也即是一种约束，所以处理问题将求助于拉格朗日方程。对这些问题的分析，可应用于了解分子的振动、固体的晶格振动等。在本节中先用一个简单的例子说明处理问题的方法，并初步涉及晶格振动问题。此后，在量子力学和统计物理部分，将介绍谐振子的能量量子化和玻色——爱因斯坦统计方法，对于晶格振动问题即能做进一步的分析和讨论。

1. 一个简单的例子

讨论用性质完全相同，质量可以忽略不计的弹簧连接的两个小球的振动问题，以显示处理问题的方法。如图 1-1，两球以弹簧耦合在一起，在无摩擦平面上运动，图中标出的 x_1、x_2 代表球离开平衡位置的位移，两小球质量相同，以 m 代表，弹簧的倔强系数用 k 代表，由两球及弹簧组成的这一系统的弹性势能为

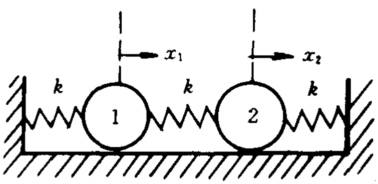

图 1-1

$$U=\frac{1}{2}kx_1^2+\frac{1}{2}k(x_1-x_2)^2+\frac{1}{2}kx_2^2$$
$$=kx_1^2+kx_2^2-kx_1x_2 \tag{1-8}$$

动能为

$$T=\frac{1}{2}m\dot{x}_1^2+\frac{1}{2}m\dot{x}_2^2 \tag{1-9}$$

于是，拉格朗日函数为

$$L=T-U=\frac{1}{2}m(\dot{x}_1^2+\dot{x}_2^2)-\frac{1}{2}k[x_1^2+(x_1-x_2)^2+x_2^2] \tag{1-10}$$

两球的运动方程则为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1}-\frac{\partial L}{\partial x_1}=m\ddot{x}_1+kx_1+k(x_1-x_2)$$

$$=m\ddot{x}_1+2kx_1-kx_2=0 \tag{1-11}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2}-\frac{\partial L}{\partial x_2}=m\ddot{x}_2+kx_2+k(x_2-x_1)$$

$$=m\ddot{x}_2+2kx_2-kx_1=0 \tag{1-12}$$

把(1-11)式写成

$$\ddot{x}_1+\frac{2k}{m}x_1-\frac{k}{m}x_2=0$$

或

$$\ddot{x}_1+\omega_0^2x_1-\frac{k}{m}x_2=0 \tag{1-13}$$

其中把 $2k/m$ 写成 ω_0^2。同样,可以把(1-12)式写成

$$\ddot{x}_2+\omega_0^2x_2-\frac{k}{m}x_1=0 \tag{1-14}$$

把(1-13)、(1-14)二式联立,取试探解

$$x_1=A_1\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\quad,\qquad x_2=A_2\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$$

代入(1-13)、(1-14)两式后,消去公共因子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$,可得

$$(\omega_0^2-\omega^2)A_1-\frac{k}{m}A_2=0 \tag{1-15}$$

$$-\frac{k}{m}A_1+(\omega_0^2-\omega^2)A_2=0 \tag{1-16}$$

由(1-15)式得

$$\frac{A_1}{A_2}=\frac{k/m}{\omega_0^2-\omega^2}$$

由(1-16)式得

$$\frac{A_1}{A_2}=\frac{\omega_0^2-\omega^2}{k/m}$$

因系从联立方程得出,故二者不能矛盾,所以应有

$$\frac{k/m}{\omega_0^2-\omega^2}=\frac{\omega_0^2-\omega^2}{k/m}$$