



中 外 物 理 学 精 品 书 系

前 沿 系 列 · 2 4

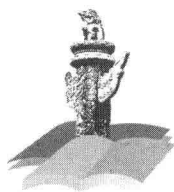
现代量子力学基础

(第二版)

程檀生 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS



国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION

中 外 物 理 学 精 品 书 系

前 沿 系 列 · 2 4

现代量子力学基础

(第二版)

程檀生 编著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

现代量子力学基础/程檀生编著. —2 版. —北京大学出版社, 2013. 11
(中外物理学精品书系)

ISBN 978-7-301-23368-9

I. ①现… II. ①程… III. ①量子力学-教材 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 248248 号

书 名: 现代量子力学基础(第二版)

著作责任者: 程檀生 编著

责任编辑: 顾卫宇

标准书号: ISBN 978-7-301-23368-9/O · 0955

出版发行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址: <http://www.pup.cn>

新浪微博: @北京大学出版社

电子信箱: zpup@pup.cn

电 话: 出版部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62752021 出版部 62754962

印 刷 者: 北京中科印刷有限公司

经 销 者: 新华书店

730 毫米×980 毫米 16 开本 28.25 印张 570 千字

2006 年 2 月第 1 版

2013 年 11 月第 2 版 2013 年 11 月第 1 次印刷

定 价: 75.00 元

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有,侵权必究

举报电话:010-62752024 电子信箱:fd@pup.pku.edu.cn

“中外物理学精品书系”

编委会

主任：王恩哥

副主任：夏建白

编委：（按姓氏笔画排序，标*号者为执行编委）

王力军	王孝群	王牧	王鼎盛	石兢
田光善	冯世平	邢定钰	朱邦芬	朱星
向涛	刘川*	许宁生	许京军	张酣*
张富春	陈志坚*	林海青	欧阳钟灿	周月梅*
郑春开*	赵光达	聂玉昕	徐仁新*	郭卫*
资剑	龚旗煌	崔田	阎守胜	谢心澄
解士杰	解思深	潘建伟		

秘书：陈小红

序 言

物理学是研究物质、能量以及它们之间相互作用的科学。她不仅是化学、生命、材料、信息、能源和环境等相关学科的基础,同时还是许多新兴学科和交叉学科的前沿。在科技发展日新月异和国际竞争日趋激烈的今天,物理学不仅囿于基础科学和技术应用研究的范畴,而且在社会发展与人类进步的历史进程中发挥着越来越关键的作用。

我们欣喜地看到,改革开放三十多年来,随着中国政治、经济、教育、文化等领域各项事业的持续稳定发展,我国物理学取得了跨越式的进步,做出了很多为世界瞩目的研究成果。今日的中国物理正在经历一个历史上少有的黄金时代。

在我国物理学科快速发展的背景下,近年来物理学相关书籍也呈现百花齐放的良好态势,在知识传承、学术交流、人才培养等方面发挥着无可替代的作用。从另一方面看,尽管国内各出版社相继推出了一些质量很高的物理教材和图书,但系统总结物理学各门类知识和发展,深入浅出地介绍其与现代科学技术之间的渊源,并针对不同层次的读者提供有价值的教材和研究参考,仍是我国科学传播与出版界面临的一个极富挑战性的课题。

为有力推动我国物理学研究、加快相关学科的建设与发展,特别是展现近年来中国物理学家的研究水平和成果,北京大学出版社在国家出版基金的支持下推出了“中外物理学精品书系”,试图对以上难题进行大胆的尝试和探索。该书系编委会集结了数十位来自内地和香港顶尖高校及科研院所的知名专家学者。他们都是目前该领域十分活跃的专家,确保了整套丛书的权威性和前瞻性。

这套书系内容丰富,涵盖面广,可读性强,其中既有对我国传统物理学发展的梳理和总结,也有对正在蓬勃发展的物理学前沿的全面展示;既引进和介绍了世界物理学研究的发展动态,也面向国际主流领域传播中国物理的优秀专著。可以说,“中外物理学精品书系”力图完整呈现近现代世界和中国物理

科学发展的全貌,是一部目前国内为数不多的兼具学术价值和阅读乐趣的经典物理丛书。

“中外物理学精品书系”另一个突出特点是,在把西方物理的精华要义“请进来”的同时,也将我国近现代物理的优秀成果“送出去”。物理学科在世界范围内的重要性不言而喻,引进和翻译世界物理的经典著作和前沿动态,可以满足当前国内物理教学和科研工作的迫切需求。另一方面,改革开放几十年来,我国的物理学研究取得了长足发展,一大批具有较高学术价值的著作相继问世。这套丛书首次将一些中国物理学者的优秀论著以英文版的形式直接推向国际相关研究的主流领域,使世界对中国物理学的过去和现状有更多的深入了解,不仅充分展示出中国物理学研究和积累的“硬实力”,也向世界主动传播我国科技文化领域不断创新的“软实力”,对全面提升中国科学、教育和文化领域的国际形象起到重要的促进作用。

值得一提的是,“中外物理学精品书系”还对中国近现代物理学科的经典著作进行了全面收录。20世纪以来,中国物理界诞生了很多经典作品,但当时大都分散出版,如今很多代表性的作品已经淹没在浩瀚的图书海洋中,读者们对这些论著也都是“只闻其声,未见其真”。该书系的编者们在这方面下了很大工夫,对中国物理学科不同时期、不同分支的经典著作进行了系统的整理和收录。这项工作具有非常重要的学术意义和社会价值,不仅可以很好地保护和传承我国物理学的经典文献,充分发挥其应有的传世育人的作用,更能使广大物理学人和青年学子切身体会我国物理学研究的发展脉络和优良传统,真正领悟到老一辈科学家严谨求实、追求卓越、博大精深的治学之美。

温家宝总理在2006年中国科学技术大会上指出,“加强基础研究是提升国家创新能力、积累智力资本的重要途径,是我国跻身世界科技强国的必要条件”。中国的发展在于创新,而基础研究正是一切创新的根本和源泉。我相信,这套“中外物理学精品书系”的出版,不仅可以使所有热爱和研究物理学的人们从中获取思维的启迪、智力的挑战和阅读的乐趣,也将进一步推动其他相关基础科学更好更快地发展,为我国今后的科技创新和社会进步做出应有的贡献。

《中外物理学精品书系》编委会 主任
中国科学院院士,北京大学教授

王恩哥

2010年5月于燕园

内 容 简 介

本书意在深入浅出地介绍量子力学的概念、方法及新的进展,可作为物理学类学生及自学者的教材或参考书.全书共分十二章:第一章介绍一些经典物理无法处理的实验问题;第二章、第四章、第六章、第七章和第八章介绍量子力学的基本概念和基本方法;第三章和第五章介绍有解析解的一些问题;最后四章(第九章、第十章、第十一章和第十二章)介绍量子力学的近似方法,在这些近似方法中,包括了对简并能级微扰论作进一步的讨论,也包括了较为实用的达尔戈诺-刘易斯方法以及磁共振、绝热近似和贝利相位.目录前标有*号的章节或小字号的附注内容可作为习题课、讲座或课外阅读之用;即使无*号标记的章节或附注,教师仍可根据同学的具体情况酌情删减.当然,本书也可作为研究生提高基础水平和教师教学的参考书.

第二版前言

第二版修订,作者主要的考虑有:

力学量的算符描述及其对易性,是表征了量子力学的特征,为此,在新版中,对算符的自然展开和因子化方法作了更多的强调.

新版中,也对测量、密度算符、磁共振、纠缠态、连续谱中的束缚态,以及位势中束缚态与散射相位关系的讨论等内容作了扩展.

对鲜有介绍而又极为有用的微扰近似方法——达尔戈诺-刘易斯近似方法,进行了扩充.为了纠正某些模糊的观念,书中仍花一定的篇幅于束缚态的简并微扰论的讨论.所有这些扩展的目的就是使读者们对量子力学的基本假设和它的特征有进一步的认识.希望他们能在学习中树立信心,引发兴趣,进而参与到量子理论的研究和量子技术的发展的行列中.

在新版中,还对第一版中的不妥和差错之处作了修正.我特别要提到的是,这些不妥和差错很多是我的学生指出的.对他们仔细参阅本书并提出异议或建议表示由衷的赞赏和谢意.

在新版编著中,幸运地仍得到很多同仁,特别是一同教学的同事们的支持和鼓励.尤其在杨泽森教授、林宗涵教授、宁平治教授、关洪教授和吴崇试教授就量子力学原理和相关的数学问题的讨论中受益匪浅.在此一并致谢.

与此同时,作者编著了一本与本书紧密相扣的《量子力学习题指导》,以帮助读者检验和提高学习的效果.

在编写和校订过程中,作者始终抱着对读者负责的宗旨,尽力避免给读者以错误的引导或错误的结论.但由于书中涉及的面较广,量子力学中的有些问题仍有不同看法,而书中的表述又必然反映作者的观点,因而不妥之处在所难免,衷心期望读者及有关专业人士予以指出.

作者由衷地感谢“中外物理学精品书系”编委会提供给作者这个机会,能将有关量子力学的基本概念和数学工具的心得和体会,进一步展现给读者.作者非常感谢北京大学出版社编辑和相关人员为本书出版所付出的辛勤劳动.正是他们的配合,才使本书能及早地展示给读者.

程檀生

2013年8月于北京大学蓝旗营

前 言

在北京大学校方、北京大学物理学院和北京大学出版社的资助和支持下出版本书,我为能尽自己的微薄之力,让读者多一本可选的参考书而感到欣慰,希望本教程能使读者在学习量子力学时较容易些,特别希望他们能在学习中树立信心,引发兴趣,进而参与到量子理论研究和量子技术发展的行列中。

近 30 年来,量子物理学不论在自身的理论方面还是在技术应用方面都取得难以想象的进展,而且已扩展到很多领域和学科,如化学、生物学、生命科学、天文学、材料科学和信息科学等,极大地促进了它们的发展,成为近代科学的理论基础。许多新的实验事实,例如单电子的双缝干涉实验的成功,把读者从假想的实验事实的困境中解脱出来;扫描隧穿显微镜的发明更是把经典物理学绝不认可的隧穿效应应用于物质表面的研究。至于核磁共振成像仪的发明及其在医学上的应用以及量子计算机和量子信息的发展前景更直接表明,量子物理学是人类发展史上最光彩耀目的现代文明发展的理论基石。

本书主要介绍量子力学的基本概念和数学工具,特别是对态叠加原理、波函数、力学量算符、不确定关系和测量结果等的讨论,并时时将新的概念和结论与经典物理学的结果作比较,以使读者能正确理解量子力学的基本概念,尽快摆脱经典物理观念的约束和误导。为使读者能正确了解量子力学的精髓,我着重介绍与相位、算符和对易关系相关的内容,如绝热近似、贝利相位、阿哈朗诺夫-玻姆效应、达尔戈诺-刘易斯近似方法以及因子化方法;也增添篇幅介绍量子力学新发展和新应用,如隧穿效应、相干态、磁通量子化、磁共振、贝尔不等式和连续谱中的束缚态等内容。今天,量子物理学已成为进入科学和技术前沿问题研究不可或缺的基础,学习量子物理学已不再是物理类专业学生的“专利”。为此,我在论述量子力学的基本原理和推导其相关公式时有意识地详尽些,并将一些必要的辅助内容和工具编入附录,以帮助志在学习的读者提高自学效果。

在本书的编写过程中,我得到很多同仁,特别是一同教学的同事们的支持和鼓励。尤其在与杨泽森教授、林宗涵教授、宋行长教授和宁平治教授就量子力学相关问题的讨论中受益匪浅,在具体编写中得到了吴崇试教授的鼎力相助,在此一并致谢。

在本书出版前,杨立铭院士已离我们远去。他在有生之年对我的关怀和教诲是

我毕生难忘的. 我的点滴成果都包含了他的心血. 我将永远铭记他.

在编写本书的过程中, 我始终抱着对读者负责的宗旨, 力求避免给读者以错误的引导或错误的结论. 但由于编写的时间仓促, 难免出现差错, 衷心期望读者的指正.

程檀生

2005 年 10 月于蓝旗营

目 录

第一章 经典物理学的失效	(1)
1.1 辐射的微粒性	(2)
1.2 原子结构的稳定性	(9)
1.3 物质粒子的波动性	(12)
习题	(16)
第二章 波函数与波动方程	(17)
2.1 波粒二象性	(18)
2.2 波函数的统计解释——概率波	(20)
2.3 波函数的性质,态叠加原理	(21)
2.4 含时间的薛定谔方程	(32)
2.5 不含时间的薛定谔方程,定态问题	(42)
2.6 不确定关系	(44)
习题	(51)
第三章 一维定态问题	(53)
3.1 一维定态解的共性	(53)
3.2 隧穿效应和扫描隧穿显微镜	(57)
3.3 势垒散射	(60)
3.4 方势阱散射	(64)
* 3.5 波包散射和时间延迟	(65)
3.6 一维无限深方势阱	(67)
3.7 宇称,有限深对称方势阱,双 δ 势阱	(69)
3.8 一维谐振子势的代数解法	(77)
* 3.9 周期场中的运动	(86)
3.10 相干态	(90)
习题	(95)
第四章 量子力学中的力学量	(99)
4.1 力学量算符的性质	(99)

4.2	厄米算符的本征值和本征函数	(106)
4.3	连续谱本征函数“归一化”	(112)
4.4	算符的共同本征函数	(118)
4.5	力学量平均值随时间的变化,运动常数,埃伦费斯特定理	(128)
	习题	(132)
第五章	变量可分离型的三维定态问题	(136)
5.1	有心势	(136)
5.2	赫尔曼-费恩曼(Hellmann-Feynman)定理	(156)
5.3	三维各向同性谐振子	(157)
5.4	带电粒子在外电磁场中的薛定谔方程,恒定均匀场中 带电粒子的运动	(160)
* 5.5	连续谱中的束缚态	(167)
	习题	(169)
第六章	量子力学的矩阵形式及表示理论	(173)
6.1	量子体系状态的表示	(173)
6.2	狄拉克符号介绍	(174)
6.3	投影算符和密度算符	(182)
6.4	表象变换,么正变换	(189)
6.5	平均值,本征方程和薛定谔方程的矩阵形式	(192)
6.6	量子态的不同描述	(197)
	习题	(203)
* 第七章	量子力学的算符代数方法——因子化方法	(206)
7.1	哈密顿量的本征值和本征矢	(206)
7.2	因子化方法的一些例子	(208)
7.3	形状不变伴势和谐的超对称性	(214)
7.4	算符代数法和奇异势之解	(220)
7.5	同谱势和连续谱中的束缚态之解	(225)
	习题	(230)
第八章	自旋	(232)
8.1	电子自旋存在的实验事实	(232)
8.2	自旋——微观客体特有的内禀角动量	(234)
8.3	碱金属的双线结构	(243)

8.4	两个自旋为 $1/2$ 的粒子的自旋波函数	(250)
8.5	纠缠态	(252)
8.6	爱因斯坦、帕多尔斯基和罗森佯谬, 贝尔不等式	(255)
8.7	全同粒子交换不变性——波函数具有确定的置换对称性	(259)
	习题	(269)
第九章	量子力学中束缚态的近似方法	(272)
9.1	定态微扰论	(272)
9.2	变分法	(297)
* 9.3	达尔戈诺-刘易斯方法	(302)
* 9.4	双原子分子	(309)
	习题	(318)
第十章	含时间的微扰论——量子跃迁	(321)
10.1	量子跃迁	(321)
10.2	微扰引起的跃迁	(326)
10.3	磁共振	(332)
10.4	绝热近似	(337)
10.5	贝利(Berry)相位	(342)
	习题	(346)
第十一章	量子散射的近似方法	(348)
11.1	一般描述	(348)
11.2	玻恩近似, 卢瑟福散射	(352)
11.3	有心势中的分波法和相移	(357)
11.4	共振散射	(363)
11.5	全同粒子的散射	(367)
	习题	(371)
* 第十二章	量子力学的经典极限和 WKB 近似	(373)
12.1	量子力学的经典极限	(373)
12.2	WKB 近似	(376)
	习题	(386)
附录 I	数学分析	(388)
I.1	矢量分析公式	(388)
I.2	正交曲面坐标系中的矢量分析公式	(389)

附录 II 一些有用的积分公式	(391)
附录 III δ 函数	(393)
III. 1 δ 函数的定义和表示	(393)
III. 2 δ 函数的性质	(395)
III. 3 δ 函数的导数	(397)
附录 IV 特殊函数	(398)
IV. 1 合流超几何函数	(398)
IV. 2 贝塞尔函数	(400)
IV. 3 球贝塞尔函数	(401)
IV. 4 厄米多项式	(403)
IV. 5 勒让德多项式和连带勒让德函数	(404)
IV. 6 球谐函数	(408)
附录 V 角动量的基本关系	(412)
附录 VI 基本物理常数表	(420)
部分答案和提示	(422)
参考书目	(426)
索引	(427)

第一章 经典物理学的失效

19 世纪末,牛顿力学的确立,光的波动性的确定,将光和电磁现象建立在牢固基础上的麦克斯韦方程组以及统计处理规律的建立,使人们能很成功地解释观察到的绝大多数现象.于是,人们认为物理学的普遍规律似乎已非常好地被建立了:整个自然界的现象能够根据物体和场的相互作用而被适当地说明、解释和预言;物体的所有运动及在场中所有的变化被认为是连续的,可以在一定初条件下,由相应的微分或偏微分方程来计算得到;通过位置、动量和场强,整个世界可无限详尽地被完全描述;整个行为完全被确定,原则上与它是否被观察无关.

但是,经典物理学处理的仅涉及自然界中与物质的根本结构没有直接关系的问题.所以,一旦深入到分子、原子领域,人们就因一些实验事实和经典理论发生矛盾而感到困惑.但这也暗示存在一种崭新的,看起来与经典物理学完全不相容的概念,如:辐射的微粒性,物质粒子的波动性,物理量的“量子化”,即物理量的测量值取分立值或某些确定值.

由于经典物理学描述与物质基本结构没有直接关系的那些问题,并不注意对象的微观组成,而是对整体进行描述.因此,无论它的描述如何精确,也只是量子物理学的一个极限近似.所谓完全符合经典物理学的规律,也仅意味着“量子”效应在这过程中没有被察觉到.从这个意义上说,整个物理学都是量子物理学.

量子物理学中认为,一切满足普遍规律的事件,都可能发生;而经典物理学则可能认为某些过程或事件是根本不可能发生的,如 α 衰变,磁通量的量子化,等等.

应该强调指出:量子现象的揭示是从原子、分子等微观范围的现象中开始的.而量子物理学不仅仅支配微观世界,同样也支配宏观世界的运动.所以,不应该认为“量子物理学”是某种与宏观世界问题毫无关系的规律.事实上,在一些宏观现象中,“量子”现象也很显著,而经典物理学是无法描述它们的,如:磁通量量子化,超导现象,超流现象,玻色-爱因斯坦凝聚,等等.所以,量子现象并不是一定仅在原子尺度下存在.事实上,它取决于量子现象是否能观测到(可忽略否),取决于经典物理的近似是否适合.

今天,据此建立起来的新的完全不同于经典物理学的量子力学(量子物理学)的规律已深入到物理学的各个领域,并正成功地促进了天体物理、宇宙学、量子光学、凝聚态物质、化学、材料科学等基础科学研究的飞速发展.晶体管、集成块、激光器、磁共振成像仪、扫描隧穿显微镜、光镊子和纳米材料等的发明和制造成功,充分

展示了量子力学已成为现代文明发展的基石.

1.1 辐射的微粒性

1.1.1 黑体辐射

若照射到物体上的辐射完全被吸收,则称该物体为黑体.

基尔霍夫(G. R. Kirchhoff)证明,对任何一个物体,辐射本领(radiating capacity) $E(\nu, T)$ 与吸收率 $A(\nu, T)$ 之比仅与频率 ν 和温度 T 有关,是一个与组成物体的物质无关的普适函数(以 $f(\nu, T)$ 表示),即

$$E(\nu, T)/A(\nu, T) = f(\nu, T). \quad (1.1)$$

其中,辐射本领 $E(\nu, T)$ 为单位时间内从辐射体表面的单位面积上发射出的辐射能量的频率分布. 所以,在 Δt 时间,从 ΔS 面积上发射出频率在 $\nu - \nu + \Delta\nu$ 范围内的能量为

$$E(\nu, T) \Delta t \Delta S \Delta \nu.$$

因此, $E(\nu, T)$ 的单位为 J/m^2 . 可以证明,辐射本领与辐射体的能量密度分布 $u(\nu, T)$ 的关系为

$$E(\nu, T) = \frac{c}{4} u(\nu, T), \quad (1.2)$$

$u(\nu, T)$ 的单位为 $\text{J} \cdot \text{s}/\text{m}^3$.

吸收率 $A(\nu, T)$ 则为照到物体上的辐射能量分布被吸收的份额. 由于黑体的吸收率为 1, 所以它的辐射本领

$$E(\nu, T) = f(\nu, T),$$

即等于普适函数(与物质无关). 一旦将黑体辐射本领研究清楚了,也就把普适函数(对物质而言)弄清楚了.

我们也可以以 $E(\lambda, T)$ 来表示辐射本领. 可以证明

$$E(\lambda, T) = \frac{\nu^2}{c} E(\nu, T). \quad (1.3)$$

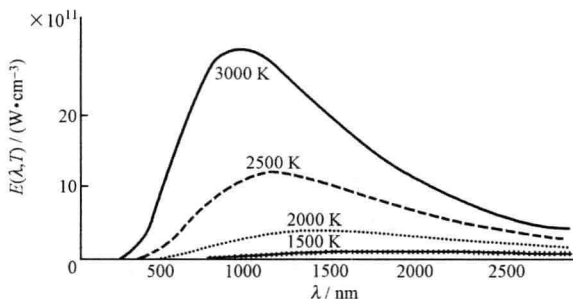
$E(\lambda, T)$ 的单位为 $\text{J}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$.

A. 黑体的辐射本领

实验测得黑体辐射本领 $E(\lambda, T)$ 与 λ 的变化关系(见图 1.1). 而在理论上,人们有

(i) 维恩(Wien)公式: 维恩(W. Wien)根据热力学第二定律,用一模型得出的辐射本领,为

$$E(\lambda, T) = \frac{C_1}{\lambda^5} c^4 e^{-C_2 \cdot c/\lambda T}, \quad (1.4)$$

图 1.1 实验得出的 $E(\lambda, T)$ 随 λ 的变化

其中, c 为光速, C_1, C_2 为常数.

(ii) 瑞利-金斯^①(Rayleigh-Jeans)公式: 瑞利和金斯根据电动力学及统计力学严格导出的辐射本领, 为

$$E(\lambda, T) = \frac{2\pi c}{\lambda^4} kT, \quad (1.5)$$

其中, k 为玻尔兹曼常数, $k = 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K}$.

从图 1.2 中可看出, 仅当波长足够长, 温度足够高, 即 $\lambda T \gg 10^{-2} \text{ m} \cdot \text{K}$ 时, 瑞利-金斯公式的 $E(\lambda, T)$ 才符合实验结果. 但在 $\lambda \rightarrow 0$ 时, 则为无穷, 出现所谓的紫外灾难. 而维恩的公式, 仅在短波符合, 而长波不符合. 所以, 这两个公式都不能完全符合实验结果, 也就是说, 由经典理论导出的辐射本领不能解释实验结果.

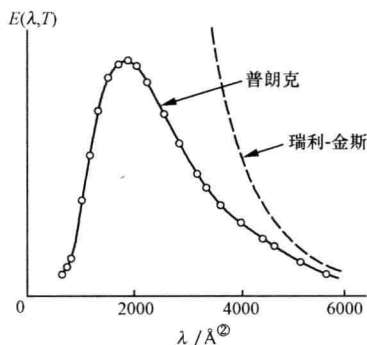
B. 斯特藩-玻尔兹曼定律 (Stefan-Boltzmann law)

斯特藩 (J. Stefan) 和玻尔兹曼 (L. Boltzmann) 发现, 黑体辐射能量 (单位时间、单位面积发射的能量) 与绝对温度 T^4 成正比:

$$\int E(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4. \quad (1.6)$$

(事实上, $\sigma = 2\pi^5 k^4 / (15h^3 c^2) = 5.67 \times 10^{-8} \text{ J/(K}^4 \cdot \text{s} \cdot \text{m}^2)$.)

显然, 由维恩公式或瑞利-金斯公式得不出这样的结果.

图 1.2 $E(\lambda, T_0)$ 的实验结果与理论值的比较

① L. Rayleigh, Phil. Mag., 49 (1900)539; J. H. Jeans, Phil. Mag., 10 (1905)91.

② $1 \text{ Å} = 10^{-10} \text{ m}$.