

SCHAUM'S
ouTlines

全美经典 学习指导系列

量子力学

〔美〕 Y. 皮莱格 D. 普尼尼 E. 扎阿鲁尔 著
邢泽仁 宁铂 译

获得好成绩的帮手

介绍了量子力学课程的所有内容

二百多道精解习题

掌握量子力学习题解法的工具

优秀教材的补充读物



科学出版社
麦格劳-希尔教育出版集团

内 容 简 介

本书讲解深入浅出,240多道详细解答的问题帮助学生打下牢固的基础.基础知识讲解清晰准确,大大减轻了学生学习的难度并增加了可记忆性.主要包括导论、数学预备知识、薛定谔方程及其应用、量子力学基础、谐振子、角动量、自旋、类氢原子、电磁场中的粒子运动、量子力学问题的解法、量子力学的数值方法、全同粒子、角动量、散射理论、辐射的半经典处理、数学附录.

本书适合自学,也宜于专业人员使用.

Yoav Peleg, Reuven Pnini, Elyahu Zaarur: Schaum's Outline of Theory and Problems of Quantum Mechanics

ISBN: 0-07-054018-7

Copyright © 1998 by the McGraw-Hill Companies, Inc.

Authorized translation from the English language edition published by McGraw-Hill Companies, Inc.

All rights reserved.

本书中文简体版由科学出版社和美国麦格劳-希尔教育出版集团合作出版,未经出版者书面许可,不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分.

版权所有,翻印必究.

本书封面贴有 McGraw-Hill 公司防伪标签,无标签者不得销售.

图字:01-2001-1764 号

图书在版编目(CIP)数据

量子力学/[美]Y.皮莱格等著;邢泽仁,宁铂译,思聪审校.—北京:科学出版社,2002.2
(全美经典学习指导系列)

ISBN 7-03-010014-X

I. 量… II. ①皮…②邢…③宁…④思… III. 量子力学-高等学校-习题
IV. O413.1-44

中国版本图书馆.CIP 数据核字(2002)第 005036 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2002 年 3 月第 一 版 开本:A4(890×1240)

2002 年 3 月第一次印刷 印张:18 3/4

印数:1—4 000 字数:537 000

定价: 28.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

序 言

毫无疑问,量子力学是物理学最重要而又最难学的一个分支,它是我们用最现代的观点理解物质世界的基础.

现在,有许多很好用的量子力学教科书可以买到,每一种都有自己的特色和方法.本书的方法是提供给初学者大范围的有充足选择余地的问题和解答,这些问题和解答覆盖了量子力学导论性课程的所有主要方面.特别着重之处放在给出基本概念和结果.学好量子力学导论的部分任务涉及到掌握正规的(数学的)方法,这是因为要想有能力进入更高级的专题,掌握正规方法是完全必要的.我们努力给出能表明量子力学在解决实际问题时有应用价值的题目.我们还发现,由于计算机已成为应用物理学家的重要工具,编入数值方法一章是非常有益的.

我们渴望感谢对本书的完成有贡献和帮助的下列人员:

Uri Onn 博士、Zhair Millad 硕士、Moran Furman 硕士和 Arga Bart 硕士.

我们希望本书将帮助量子力学的初学者克服最初的困难,掌握好这一令人神往而又重要的学科.

Y. 皮莱格

R. 普尼尼

E. 扎阿鲁尔

14

目 录

第一章 导论	(1)
1.1 电磁辐射的粒子性	(1)
1.2 光的二象性	(2)
1.3 实物粒子的二象性	(2)
1.4 波包和测不准关系	(3)
第二章 数学预备知识	(9)
2.1 复域 C	(9)
2.2 C 上的矢量空间	(10)
2.3 线性算符和矩阵	(10)
2.4 本征矢量和本征值	(12)
2.5 傅里叶级数和傅里叶变换	(12)
2.6 狄拉克 δ 函数	(13)
第三章 薛定谔方程及其应用	(19)
3.1 单粒子波函数	(19)
3.2 薛定谔方程	(19)
3.3 不含时势中的粒子	(19)
3.4 波函数的标量积 算符	(20)
3.5 概率密度和概率流	(21)
第四章 量子力学基础	(46)
4.1 导论	(46)
4.2 量子力学中的基本假设	(46)
4.3 平均值和方差	(47)
4.4 对易可观测量	(47)
4.5 算符的函数	(48)
4.6 厄米共轭	(48)
4.7 离散的和连续的态空间基	(48)
4.8 表象	(49)
4.9 时间演化	(52)
4.10 测不准关系	(53)
4.11 薛定谔图像和海森伯图像	(53)
第五章 谐振子	(74)
5.1 导论	(74)
5.2 厄米多项式	(74)
5.3 二维和三维谐振子	(75)
5.4 谐振子的算符方法	(75)
第六章 角动量	(90)
6.1 导论	(90)
6.2 对易关系	(90)
6.3 降算符和升算符	(90)
6.4 角动量代数	(91)

6.5	微分表示	(92)
6.6	角动量的矩阵表示	(93)
6.7	球对称势	(94)
6.8	角动量和转动	(94)
第七章	自旋	(114)
7.1	定义	(114)
7.2	$1/2$ 自旋	(114)
7.3	泡利矩阵	(114)
7.4	降算符和升算符	(115)
7.5	自旋空间的旋转	(115)
7.6	与磁场的相互作用	(115)
第八章	类氢原子	(132)
8.1	有心势场中的粒子	(132)
8.2	两个相互作用的粒子	(133)
8.3	氢原子	(133)
8.4	氢原子的能级	(134)
8.5	平均值表达式	(135)
8.6	类氢原子	(135)
第九章	电磁场中的粒子运动	(144)
9.1	电磁场及其有关的势	(144)
9.2	电磁场中粒子的哈密顿量	(144)
9.3	概率密度和概率流	(145)
9.4	磁矩	(145)
9.5	单位制	(145)
第十章	量子力学问题的解法——部分 A	(165)
10.1	定态微扰论	(165)
10.2	非简并能级的微扰	(166)
10.3	简并能级的微扰	(166)
10.4	含时微扰论	(167)
第十一章	量子力学问题的解法——部分 B	(189)
11.1	变分法	(189)
11.2	半经典近似(WKB 近似)	(189)
第十二章	量子力学的数值方法	(203)
12.1	数值积分	(203)
12.2	函数方程求根	(204)
12.3	常微分方程的积分	(204)
第十三章	全同粒子	(218)
13.1	引论	(218)
13.2	置换与波函数的对称性	(218)
13.3	Bose 子和 Fermi 子	(219)
第十四章	角动量(续)	(226)
14.1	引论	(226)
14.2	$\{ j_1 ^2, j_2 ^2, J ^2, J_z\}$ 对应的基	(226)
14.3	CG 系数	(227)

第十五章 散射理论	(246)
15.1 散射截面	(246)
15.2 定态散射	(246)
15.3 Born 近似	(247)
15.4 分波展开	(248)
15.5 全同粒子的散射	(249)
第十六章 辐射的半经典处理	(273)
16.1 辐射与原子系统的相互作用	(273)
16.2 含时微扰论	(273)
16.3 跃迁速率	(274)
16.4 多极跃迁	(274)
16.5 自发辐射	(274)
数学附录	(287)
A.1 傅里叶级数和傅里叶积分	(287)
A.2 狄拉克 δ 函数	(287)
A.3 厄米多项式	(288)
A.4 勒让德多项式	(289)
A.5 连带勒让德函数	(289)
A.6 球谐函数	(290)
A.7 连带拉盖尔多项式	(291)
A.8 球贝塞尔函数	(291)

第一章 导 论

1.1 电磁辐射的粒子性

牛顿认为光是粒子束. 在 19 世纪, 关于光的干涉和衍射的一些实验证明了光的波动性. 后来, 光学被纳入电磁理论, 并证实光是一种电磁辐射. 然而, 直到 19 世纪末仍在研究的黑体辐射现象无法在电磁理论的框架内得到解释. 1900 年, 普朗克得到一个解释黑体辐射的公式, 后来证实这个公式可以从电磁辐射的量子化假设推导出来.

1905 年, 推广普朗克的假说时, 爱因斯坦提议, 回到光的粒子理论. 他断言: 频率为 ν 的光束由光子组成, 每个光子具有能量 $h\nu$, 这里 $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ (普朗克常数), 爱因斯坦指出了为什么引入光子就能解释尚未理解的光电效应特性. 大约 20 年后, 证实了光子作为特殊的实物的确是存在的 (康普顿效应, 参看问题 1.3).

光电效应是赫兹在 1887 年发现的, 它是使电子逃离金属表面的几种物理过程之一. 图 1-1 给出了研究光电效应所用装置的框图.

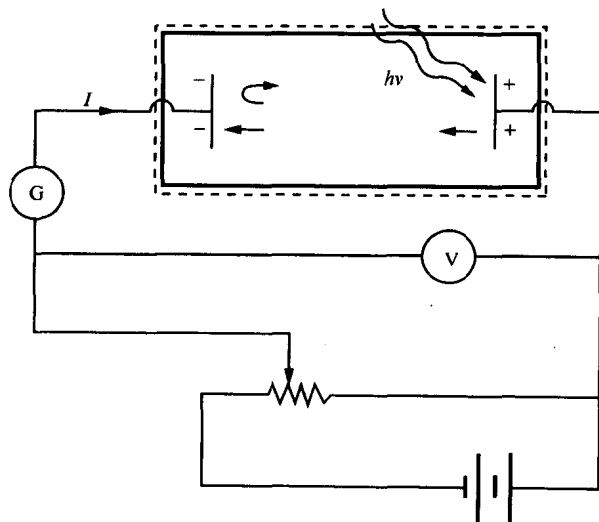


图 1-1

使得 $eV_0 = E_{\max}$ (从阳极发射出的电子的最大能量) 的临界电压 V_0 被称为截止电压. 光电效应的实验结果汇总在图 1-2 中.

- (a) 当光照射在金属表面时, 即使光强很弱, 电流也几乎是同时产生.
- (b) 对于固定的频率和阻滞电势, 光电流和光强成正比.
- (c) 对于不变的频率和光强, 光电流随阻滞电压 V 的增加而减小. 直到最后当 $V = V_0$ 时变为零.
- (d) 对于任何给定的金属表面, 截止电压 V_0 , 依赖于光的频率但和光强无关. 对于每一种金属, 都有一个阈值频率 ν_0 , 只有频率大于 ν_0 的光才能产生光电子发射; 即无论光强多大, 除非 $\nu > \nu_0$, 都不会有电子从金属表面射出.

截止电压和光频之间的实验关系可以用

$$eV_0 = h\nu - h\nu_0 \quad (1.1)$$

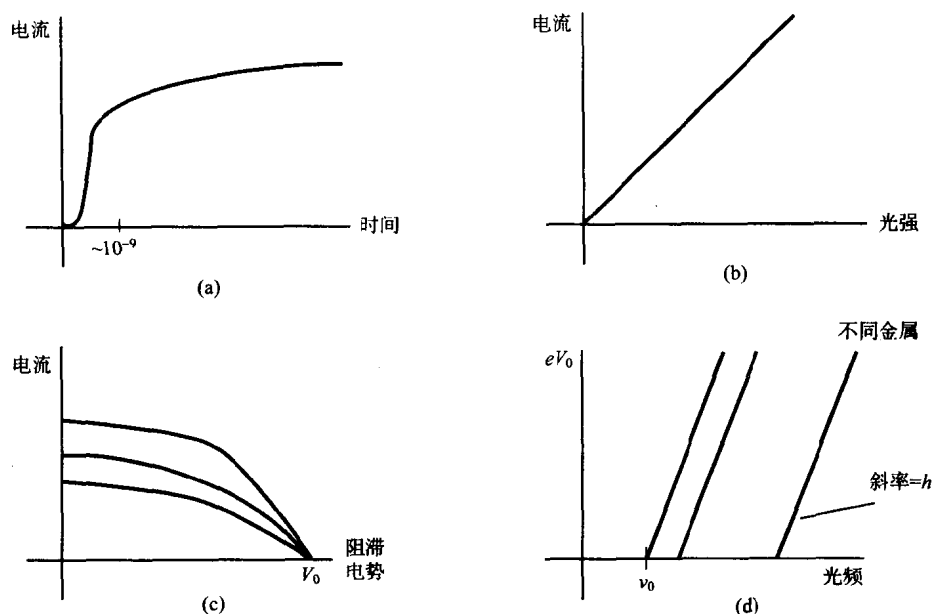


图 1-2

表示, 这里 h (普朗克常数) 对所有金属都是相同的.

1.2 光的二象性

双缝实验例 1.4 表明, 如果只考虑光的两个特性之一——波动性或粒子性——就无法解释实验结果. 光的行为同时地既像波又像粒子流; 波动性使我们能计算粒子出现的概率. 粒子的动力学参数 (能量 E 和光子动量 P) 和波动参数 (频率 ν 和波矢 k) 是关联的, 表达式为

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ p = \hbar k \end{cases} \quad (1.2)$$

这里 $\hbar = h/2\pi$. 这就是普朗克-爱因斯坦关系.

1.3 实物粒子的二象性

在发现光子的同时代, 观察到原子物理的一个基本现象. 发现一种原子只发出或吸收确定频率的光. 这一事实可以用如下的假设得到解释, 即原子的能量只能取确定的离散值. 这种离散能级的存在由 Frank-Hertz 用实验证实. 玻尔在 1913 年用电子轨道的术语对此进行了解释, 并提出如下的氢原子模型.

电子在限定的轨道上运动, 限制条件为角动量必须是 $h/2\pi$ 的整数倍. 对于半径为 r 的圆形轨道, 电子的速度由

$$mvr = \frac{nh}{2\pi}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.3)$$

给出, 库仑力和离心力之间的关系可以写成如下形式:

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{mv^2}{r} \quad (1.4)$$

这里 $-e$ 是电子电荷, 我们假定核质量是无限大. 联立 (1.3) 和 (1.4) 我们得到

$$v_n = \frac{2\pi e^2}{nh} \quad (1.5)$$

和

$$r_n = \frac{1}{4\pi^2} \frac{n^2 h^2}{me^2} \quad (1.6)$$

能量是

$$E_n = \frac{1}{2} m v_n^2 - \frac{e^2}{r} = \frac{2\pi^2 m e^2}{n^2 h^2} \quad (1.7)$$

玻尔假设, 这些轨道上的电子虽然有加速度, 但绝不产生辐射, 它们处在定态. 电子可以从一个允许轨道到另一个做不连续跳跃. 能量的变化将以辐射方式体现出来, 辐射频率为

$$\nu = \frac{E - E'}{h} \quad (1.8)$$

玻尔模型的物理基础到 1923 年仍不清楚, 那一年德布罗意将假设向前推进一步, 提出实物粒子具有波动特性; 能量为 E 、动量为 p 的粒子和角频率 $\omega = E/\hbar$ 波矢 $k = p/\hbar$ 的波相关联, 因而相应的波长是

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = h/p \quad (1.9)$$

这就是德布罗意关系.

1.4 波包和测不准关系

电磁辐射和实物粒子的波动性和粒子性可以用波包的概念统一起来. 波包是波的叠加. 我们可以构筑一个波列, 波列中的波在一个给定的空间区域外面相互干涉几乎完全消失. 于是我们得到一个局部的波包, 可以当成一个经典粒子的近似描述. 由平面波叠加形成的波包可以写成

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{k} \quad (1.10)$$

或者, 在一维情况写成

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dk \quad (1.11)$$

波包的展开式由薛定谔方程确定(参看第三章). 当按照量子力学的假设(参看第四章)将波包展开时, 曲线 $f(x)$ 和 $g(k)$ 的宽度要满足关系式

$$\Delta x \Delta k > 1 \quad (1.12)$$

引用德布罗意关系 $p = \hbar k$, 我们有

$$\Delta p \Delta x > \hbar \quad (1.13)$$

这就是海森伯测不准关系; 如果我们试图在空间构筑高度局域化的波包, 那么与之相连的动量就不能精确. 反之亦然, 将波包的动量精确限制在一个很窄的范围内, 那么波包的空间范围就势必变得很宽. 注意, 因为 $\hbar$ 很小, 经典物理的观念只在微观体系失效(参看习题 1.4 和 1.5), 测不准关系的作用是将实物粒子和辐射的波粒二象性统一起来.

考虑波包时, 应当弄清楚相速度和群速度的区别. 角频率为 $\omega = 2\pi\nu$ 波数为 $k = 2\pi/\lambda$ 的波, 其相速度是

$$v_p = \frac{\omega}{k} = \lambda\nu \quad (1.14)$$

相速度是相位不变的点在空间传播的速率. 当具有不同频率和不同相速度的一系列波合成, 在一个区域发生很强的相长干涉时, 群速度是该区域前进的速度, 它和分量波的角频率 ω 和波数 k 有关. 其关系式为

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (1.15)$$

例题解答

1.1 考虑 1.1 节描述的光电效应的四个实验结果. 对于每一个结果, 讨论它是不是电磁波经典性质所预期的结果. 我们分别讨论图 1-2 给出的每一个效应.

解 (a) 电子逃逸金属表面是由于光束提供给它一份结合能. 因为电磁辐射的连续性, 我们预期金属表面吸收的能量将正比于光束强度(单位时间单位面积的人射能量), 正比于照射面积, 正比于照射时间. 简单的计算(参看习题 1.11)表明, 在光强为 10^{-10} W/m^2 情况下, 预期在 100 小时后才会有光电子发射. 实验表明, 对相同的光强观测到的时间延迟不超过 10^{-9} s . 因而经典理论无法解释阳极上电子发射的瞬时性.

(b) 随着照射光能量的增加, 阳极上电子吸收的能量也增加. 因而, 经典理论预言: 射出电子的数目(从而电流)将随光强成正比地增加. 这里, 经典理论能够解释实验结果.

(c) 这一结果表明射出电子的能量存在一个分布, 在经典理论框架内, 该分布本身可能是起因于电子和金属结合程度的不同, 或光束传递给电子的能量在数量上的变化, 但事实是, 这里存在一个截止电势, 它和光强无关, 这一点说明逸出电子的最大能量的确不依赖于单位时间达到金属表面的能量的多少. 经典理论无法解释该实验结果.

(d) 按照经典观点, 电子从阳极发射过程依赖于光的强度, 而不依赖于光的频率. 但是, 实验上存在一个阈值频率, 入射光频小于它, 无论光强多大都没有光电子发射, 该结果无法在经典理论框架内得到预言.

1.2 用爱因斯坦光量子化假说的观点解释光电效应的实验结果. 像在问题 1.1 中一样, 我们分别讨论图 1-2 给出的每一个结果.

解 (a) 按照光由光子构成的假说, 我们预期光子能够将其能量转移给金属中的电子. 因而光电发射瞬时完成是合理的, 即使在光强很弱的情况下, 这一点和经典观念不同, 经典观念认为电子发射依赖于从光吸收能量的连续积累.

(b) 从量子理论的观点考虑, 光强等于单个光子的能量乘以单位时间穿过单位面积的光子数目. 因而单位时间发射电子的数目(和电流等价)和光强成正比, 是合理的.

(c) 电磁辐射的频率决定光子的能量 $h\nu$. 因而, 金属中电子靠吸收光获得能量, 于是对任何给定的频率, 光电子都有一个最大的动能, 这就解释了图 1.2 中描述的效应.

(d) 如果我们假设电子的结合能, 它是将电子紧紧束缚在金属上的最小能量, $\phi = h\nu_0$. 方程 1.1 就得到简单的解释. 出射电子的最大动能是 $h\nu - \phi$. 应用截止电压的定义, eV_0 是最大动能, 因而 $eV_0 = h\nu - h\nu_0$.

1.3 考虑康普顿效应(图 1-3). 按照量子理论, 频率为 ν 的电磁波束可以看作是粒子性光子束, 每一个光子具有能量 $E = h\nu$ 和动量 $p = h\nu/c = h/\lambda$, 这里 λ 是波长. 电磁辐射的散射变成光子和带电粒子的碰撞问题. 假设沿 x 轴运动的光子和质量为 m_0 的粒子碰撞, 碰撞的结果, 光子以 θ 角被散射, 其频率发生变化. 找出作为散射角函数的光子波长的增量.

解 首先, 粒子可能获得有意义的动能, 我们必须以相对论动力学的方式来使用它, 应用能量守恒我们得到

$$\text{(碰撞前)} \quad \underbrace{h\nu}_{\text{光子}} + \underbrace{E_0}_{\text{粒子}} = \underbrace{h\nu'}_{\text{光子}} + \underbrace{E}_{\text{粒子}} \quad \text{(碰撞后)} \quad (1.3.1)$$

这里 E_0 是粒子的静止能量($E_0 = mc^2$). 入射和散射光子的动量大小分别是

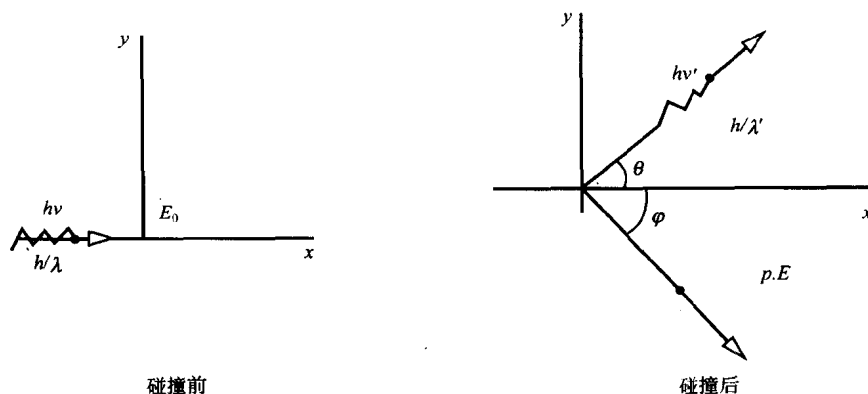


图 1-3

$$p_\lambda = \frac{h\nu}{c} = h/\lambda \quad \text{和} \quad p_{\lambda'} = \frac{h\nu'}{c} = h/\lambda' \quad (1.3.2)$$

散射角 \$\theta\$ 是 \$p_\lambda\$ 和 \$p_{\lambda'}\$ 之间的夹角. 对图 1-4 的三角形应用余弦定理, 我们有

$$p^2 = p_\lambda^2 + p_{\lambda'}^2 - 2p_\lambda p_{\lambda'} \cos \theta \quad (1.3.3)$$

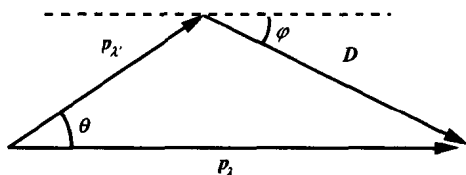


图 1-4

对于光子, 考虑到 \$pc = h\nu\$, (1.3.3) 的两边同时乘以 \$c^2\$, 因而得到

$$h^2 \nu^2 + h^2 \nu'^2 - 2h^2 \nu \nu' \cos \theta = p^2 c^2 \quad (1.3.4)$$

应用(1.3.1)于是有

$$h\nu - h\nu' = E - E_0 \Rightarrow h^2 \nu^2 + h^2 \nu'^2 - 2h^2 \nu \nu' \cos \theta = E^2 + E_0^2 - 2EE_0 \quad (1.3.5)$$

根据相对论, 我们用 \$E_0^2 + p^2 c^2\$ 代替 \$E^2\$, 从(1.3.5)减去(1.3.4)得到

$$-2h^2 \nu \nu' (1 - \cos \theta) = 2E_0^2 - 2EE_0 \quad (1.3.6)$$

所以, 应用(1.3.1)

$$h^2 \nu \nu' (1 - \cos \theta) = E_0 (E - E_0) = m \cdot c^2 (h\nu - h\nu') \quad (1.3.7)$$

我们看到 \$\frac{h}{mc^2} (1 - \cos \theta) = \frac{\nu - \nu'}{\nu \nu'} c = \frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu} = \lambda' - \lambda\$, 因而波长的增量是

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{mc^2} (1 - \cos \theta) \quad (1.3.8)$$

该式是康普顿效应的基本方程.

1.4 考虑一束光通过平行的双缝. 当双缝的任何一条被封闭, 在挡板后面屏幕上观察到典型的衍射花样(图 1-5).

当双缝同时打开, 花样表示在图 1-6 中; 在衍射轮廓线内呈现出干涉花样. 注意, 这个花样不是两个单缝衍射的叠加. 这个现象能用经典粒子性光子解释吗? 在这个实验装置中能说明光的粒子性吗?

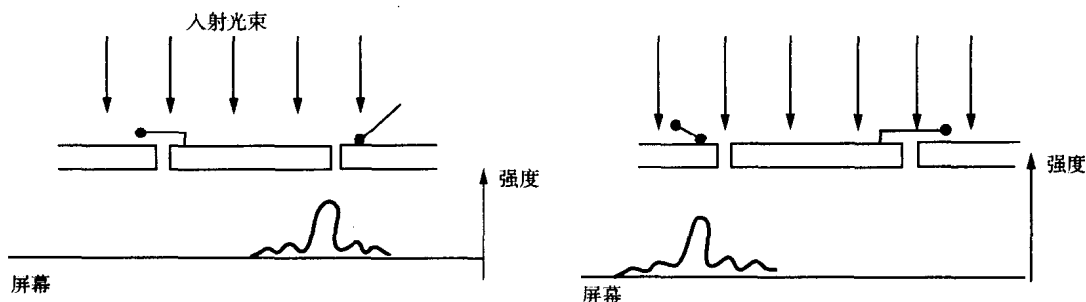


图 1-5

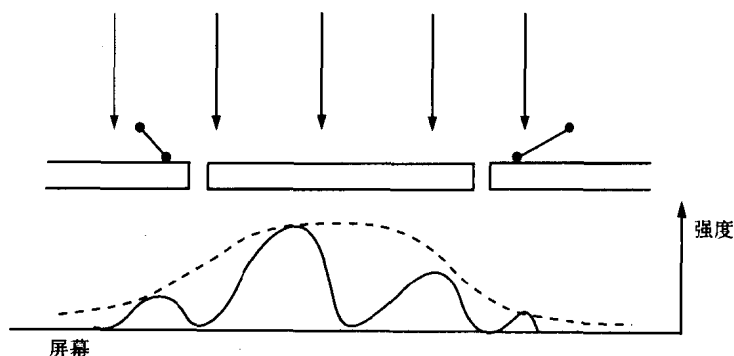


图 1-6

解 假设光束由质点式的经典粒子流构成, 如果分别考虑任一个单个粒子, 我们注意到, 它必定穿过双缝的某一条. 因而, 当两缝同时打开时, 我们得到的花样一定是分别打开每一条单缝所得花样的叠加. 然而这种结果在实验中从未观察到. 实际得到的花样只能用光同时通过双缝发生干涉来解释.

另外, 在这个系统还可以观察到光的粒子性. 如果光强很弱, 达到屏幕的光子数增加得很慢. 如果把照相底版置于屏幕位置, 花样逐时逐点地慢慢成形. 这表明光子一个一个地分别达到屏幕. 注意, 不可能决定这些光子的哪一个通过哪条窄缝. 这种测量将毁坏干涉花样.

1.5 图 1-7 简略地描述一个实验装置, 其目的是测量单个电子的位置. 具有精确动量 p_x 的电子束沿 x 轴的正方向运动, 与沿 x 轴负方向照射的光发生散射. 一个确定的电子将散射一个确定的光子, 光子通过显微镜探测.

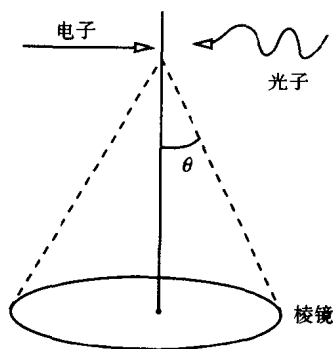


图 1-7

解 根据光学理论, 测量电子位置的精确度是

$$\Delta x \sim \frac{\lambda}{\sin \theta} \quad (1.5.1)$$

这里 λ 是光的波长. 实验表明如果我们想减小 λ 使 Δx 减小到最小, 这样做的结果是损失电子动量 x 分量的信息.

根据量子理论, 散射光也由光子组成, 每个光子具有动量 $h\nu/c$. 散射后的光子方向在棱镜孔径张角 2θ 范围内无法确定. 因此, 光子动量的 x 分量不确定度为

$$\Delta p_x \sim 2 \frac{h\nu}{c} \sin \theta \quad (1.5.2)$$

所以

$$\Delta x \Delta p_x \sim \frac{2h\nu}{c} \sin \theta \cdot \frac{\lambda}{\sin \theta} \sim 4\pi\hbar \quad (1.5.3)$$

如果我们试图通过测量屏幕的反冲以便更精确地测定光子动量的 x 分量的办法来克服这一困难,但是我们要忘记,一旦将显微镜作为整个观测系统的一部分,还必须考虑它的位置.显微镜本身必须遵从测不准关系,如果其动量被精确测定,其位置的测定势必降低精确度.所以,这个装置给不出违反测不准关系的机会.

1.6 证明当 n 很大且只涉及小量子数跃迁时,玻尔氢原子与经典情况吻合.

证 我们来计算在相邻的两个态 $n_k = n$ 和 $n_l = n - 1$ 之间跃迁所发射的光子的频率,这里 $n \gg 1$. 定义 Redberg 常数 $R = \frac{2\pi^2 me^4}{h^3 c}$, 于是有, $E_k = \frac{ch}{n_k^2} R$ 和 $E_l = \frac{ch}{n_l^2} R$. 因而发射光子的频率为

$$\nu = \frac{n_k^2 - n_l^2}{n_k^2 n_l^2} cR = \frac{(n_k + n_l)(n_k - n_l)}{n_k^2 n_l^2} cR \quad (1.6.1)$$

$n_k - n_l = 1$, 对于 $n \gg 1$, 于是我们有

$$n_k + n_l \cong 2n, n_k^2 n_l^2 \cong n^4 \quad (1.6.2)$$

所以 $\nu \cong 2cR/n^3$. 根据电磁学的经典理论,以频率 f 旋转的电荷将发出频率为 f 的辐射.另一方面,应用玻尔氢原子模型,电子绕核的轨道频率

$$f_n = \frac{v_n}{2\pi r_n} = \frac{4\pi^2 me^4}{n^3 h^2} \quad (1.6.3)$$

或 $f_n = 2cR/n^3$, 该结果和跃迁光子的频率 ν 完全相同.

1.7 证明测不准关系迫使我们放弃半经典玻尔氢原子模型.

证 在玻尔模型中,我们将电子作为经典粒子处理.容许轨道由量子化规则确定:圆形轨道半径 r 和电子绕核转动的动量 $p = mv$ 必须满足 $pr = n\hbar$ ($n = 1, 2, \dots$),以经典观点考虑电子的运动,当比较 r 和 p 时必须忽略位置和动量的不确定性,换句话说, $\Delta x \ll r, \Delta p \ll p$. 这意味着

$$\frac{\Delta x}{r} \frac{\Delta p}{p} \ll 1 \quad (1.7.1)$$

另一方面,不确定关系

$$\frac{\Delta x}{r} \frac{\Delta p}{p} \geq \frac{\hbar}{rp} \Rightarrow \frac{\Delta x}{r} \frac{\Delta p}{p} \geq \frac{1}{n} \quad (1.7.2)$$

于是,除非 $n \gg 1$, 否则(1.7.1)式和(1.7.2)式矛盾.

1.8 (a) 考虑一个热中子,其速度 v 相应于温度 $T = 300\text{K}$ 时的平均热运动能量.这样的中子束落在晶体上有可能观测到衍射图样吗?

(b) 在大加速器中,供给一个电子的能量超过 $1\text{GeV} = 10^9\text{eV}$, 这种电子相应的德布罗意波长是多少?

解 (a) 绝对温度 T 下的平均热运动能量是 $E_{av} = \frac{3}{2} kT$, 这里 k 是 Boltzmann 常数 ($k = 1.38 \times 10^{-23}\text{J/K}$), 因此,我们有

$$\frac{1}{2} m_n v^2 = \frac{p^2}{2m_n} = \frac{3}{2} kT \quad (1.8.1)$$

根据德布罗意关系,相应的波长是

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{3m_n kT}} \quad (1.8.2)$$

当 $T = 300\text{K}$, 我们有

$$\lambda = \frac{6.63 \times 10^{-34}}{\sqrt{3 \times 1.67 \times 10^{-27} \times 1.38 \times 10^{-23} \times 300}} \cong 1.4(\text{\AA}) \quad (1.8.3)$$

这是晶体中原子间隙大小的数量级,因而衍射现象和 X 射线相似.

(b) 我们注意, 电子的静止能量是 $m_e c^2 \cong 0.5 \times 10^6 \text{ eV}$. 因而, 如果 10^9 eV 的能量给予电子, 它将以接近光速的速度运动, 所以必须用相对论动力学予以处理. 相应的波长 $\lambda = h/p$ 仍有效, 但我们有 $E = \sqrt{p^2 c^2 + m_e c^2}$. 在本例题中, $m_e c^2$ 和 E 相比可以忽略, 我们得到

$$\lambda \cong \frac{hc}{E} = \frac{6.6 \times 10^{-34} \times 3 \times 10^8}{1.6 \times 10^{-10}} \text{ m} = 1.2 \times 10^{-15} \text{ m} = 1.2 \text{ fm} \quad (1.8.4)$$

将电子加速到这样大的能量, 就可以探测原子核的结构.

1.9 波导中波长和频率的关系为

$$\lambda = \frac{c}{\sqrt{\nu^2 - \nu_0^2}} \quad (1.9.1)$$

用光速 c 和相速度 $v_p = \lambda \nu$ 表示群速度

解 首先, 我们找出角频率对波数 k 的依赖关系. 我们有 $\omega = 2\pi\nu$, 于是应用(1.9.1)我们有

$$\omega(k) = 2\pi\sqrt{\frac{c^2}{\lambda^2} + \nu_0^2} = 2\pi\sqrt{\frac{c^2 k^2}{4\pi^2} + \nu_0^2} \quad (1.9.2)$$

所以, 群速度为

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{2\pi}{2\sqrt{\frac{c^2 k^2}{4\pi^2} + \nu_0^2}} \cdot \frac{2kc^2}{4\pi^2} = \frac{c^2 k}{2\pi\nu} = \frac{2\pi}{\lambda} \frac{c^2}{2\pi\nu} = \frac{c^2}{\lambda\nu} = \frac{c^2}{v_p} \quad (1.9.3)$$

补 充 习 题

1.10 参照习题 1.9, 求出群速度:

(a) $v = \sqrt{\frac{2\pi T}{\rho \lambda^3}}$ (浅水中的水波, T 是表面张力, ρ 是密度)

(b) $v = \sqrt{\frac{g}{2\pi \lambda}}$ (深水中的水波)

答案 (a) $v_g = \frac{3}{2} v_p$; (b) $v_g = \frac{1}{2} v_p$.

- 1.11 设强度为 10^{-10} W/m^2 的光垂直照射到金属表面, 原子间距近似为 3Å , 每个原子有一个自由电子. 金属表面的电子结合能是 5 eV . 假设照射在表面上的光均匀分布, 且其能量被表面电子吸收, 如果入射辐射当做经典波处理, 光束打开直到电子获得足够的能量作为光电子释放出来要多长时间?

答案 大约 2800 年.

- 1.12 强度为 I 、频率为 ν 的单色光束照射到完全吸收表面上, 设光垂直入射到表面. 应用经典电磁理论, 可以证明表面受到辐射压强的作用. 该压强和光强有关 $p = I/c$. 根据量子理论观点, 该关系式仍有效吗?

答案 有效. $p = \frac{h\nu}{c} N$, 这里 N 是光子束流量.

- 1.13 单色光被电子散射, 使用例题 1.3 的结果, 求当散射角是 90° 时, 波长的变化量. 在可见光区域 (比如说, $\lambda = 4000\text{Å}$) 波长的相对增量是多大? 对 $\lambda = 1\text{Å}$ 的 X 射线波长相对增量是多大?

答案 $\Delta\lambda = \frac{1}{m_0 c} (1 - \cos\theta) = 0.0243\text{Å}$, 对于 $\lambda = 4000\text{Å}$, 相对增量是百分之 0.006; 对 $\lambda = 1\text{Å}$, 相对增量是百分之 2.

- 1.14 我们希望证明实物粒子的波动性对于宏观物质世界是不相干的. 例如取一个直径 $1\mu\text{m}$ 和质量 $m = 10^{-15} \text{ kg}$ 的小微粒, 如果其速率是 1 mm/s 计算相应的德布罗意波长.

答案 $\lambda = 6.6 \times 10^{-6} \text{ Å}$.

- 1.15 考虑线度为 10Å 的一个病毒, 假设其密度和水的密度相等 (g/cm^3) 并位于和其线度近似相等的区域, 求病毒的最小速率.

答案 $v_{\min} \approx 1\text{ m/s}$.

第二章 数学预备知识

2.1 复域 C

复数域记为 C 是由复数 $a + bi$ 生成的域. 这里 a 和 b 是实数, 而 i 是方程 $x^2 + 1 = 0$ 的一个解, 即 $i = \sqrt{-1}$. 如果 $z = a + bi$, 那么 a 称为 z 的实部并用 $\operatorname{Re}(z)$ 表示; b 称为 z 的虚部并用 $\operatorname{Im}(z)$ 表示. $z = a + bi$ 的复数共轭是 $a - bi$, 用 $\bar{z}$ 表示. 复数的加法和乘法以如下的方式给出:

$$(a + bi) + (c + di) = (a + c) + (b + d)i \quad (2.1)$$

$$(a + bi)(c + di) = (ac - bd) + (bc + ad)i \quad (2.2)$$

如果 $z \neq 0$, 我们定义 w 和 z 的除法为

$$z^{-1} = \frac{\bar{z}}{z\bar{z}} = \frac{a}{a^2 + b^2} + \frac{-bi}{a^2 + b^2} \quad (2.3)$$

$$\frac{w}{z} = wz^{-1} \quad (2.4)$$

图 2-1 用平面上的点表示复数域.

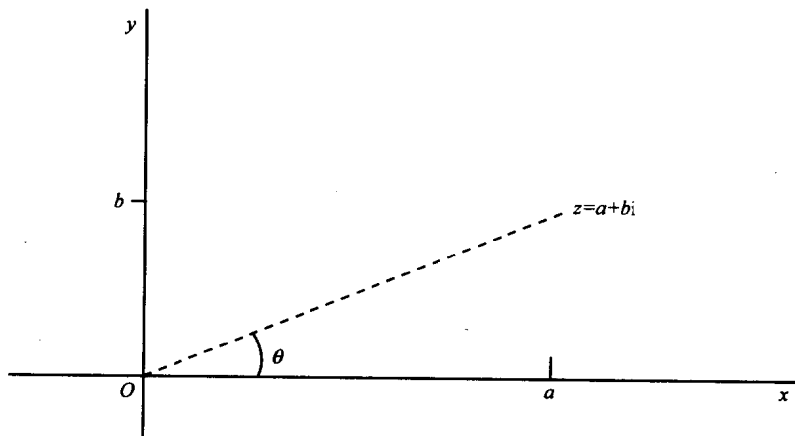


图 2-1

点 z 和 O 之间的距离为 $|z| = \sqrt{a^2 + b^2} = \sqrt{z\bar{z}}$, 并称之为 z 的模. 称 θ 角为 z 的幅角, 用 $\arg(z)$ 表示. 因为平面上的点可以用极坐标, 即一对数 (r, θ) 表示, 这里 $r > 0$ 及 $0 \leq \theta < 2\pi$, 复数可以用模和幅角写出, 因为容易证明:

$$a = r \cos \theta, \quad b = r \sin \theta \quad (2.5)$$

和

$$r = \sqrt{a^2 + b^2}, \quad \theta = \arctan\left(\frac{b}{a}\right)^* \quad (2.6)$$

* 此式是错误的, 因为反正切的取值范围为 $\left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}\right]$! 用几何方法不难给出不处在第一象限内的复数的幅角公式——译者注.

于是 $z = r(\cos\theta + i\sin\theta) = re^{i\theta}$

2.2 C 上的矢量空间

C 上的一个矢量空间是元素 V 的一个集合, 它在其元素(称为矢量)的加法(+)下是封闭的, 并且对 C 上的 α, β 和 V 上的 v, u 满足如下的条件:

1. V 中含有一个独特的元素, 记为 0, 它满足

$$v + 0 = 0 + v = v \quad (2.7)$$

0 称为零矢量.

2. αv 也在 V 中

$$3. \alpha(v + u) = \alpha v + \alpha u$$

$$4. (\alpha + \beta)v = \alpha v + \beta v$$

$$5. (\alpha \cdot \beta)v = \alpha(\beta v)$$

$$6. 0 \cdot v = 0, \alpha \cdot 0 = 0, 1 \cdot v = v$$

一个重要的例子 C^n : 考虑形为 $(z_1, z_2, \dots, z_n)$ 的元素, 这里 z_i 是复数, 我们定义这类元素的相加为

$$(z_1, z_2, \dots, z_n) + (w_1, w_2, \dots, w_n) = (z_1 + w_1, z_2 + w_2, + \dots, z_n + w_n) \quad (2.8)$$

定义标量乘法为

$$z(z_1, z_2, \dots, z_n) = (zz_1, zz_2, \dots, zz_n) \quad (2.9)$$

可以证明, 这些元素的集合具有复域 C 上矢量空间的所有性质, 这一重要的矢量空间记为 C^n .

一些有用的定义: V 中的矢量 $u_1, \dots, u_n$ 的集合覆盖 V, 如果 V 上的元素可以写成 u 的线性组合, 即

$$v = a_1 u_1 + a_2 u_2 + \dots + a_n u_n \quad (2.10)$$

这里 $a_1, a_2, \dots, a_n$ 是复数. 如果 $a_1 u_1 + a_2 u_2 + \dots + a_n u_n = 0$ 意味着 $a_1 = a_2 = \dots = a_n = 0$ 就称矢量 $u_1, u_2, \dots, u_n$ 是线性无关的. 如果 $u_1, \dots, u_n$ 是线性无关的, 并且覆盖 V, 它们被称为 V 的基. 数 n 称之为 V 的维数. 假设 W 是矢量空间 V 中的一个矢量集合. 如果: (1) 对于 W 中的每个 $v, w, v + w$ 仍在 W 中, (2) 对 W 中的每个 w 和每个标量 $\alpha, \alpha w$ 仍在 W 中, W 就称 V 的一个子空间.

2.3 线性算符和矩阵

线性算符: 令 V 是复数 C 上的矢量空间, 映射 $T: V \rightarrow V$ 是 V 上的一个算符, 如果对 C 上任意的 α, β 和 V 上任意的 u, v , 它都满足如下的条件:

$$T(\alpha v + \beta u) = \alpha T(v) + \beta T(u) \quad (2.11)$$

对 V 上的任意 u , 如果 T 和 S 是线性算符, 它们的和线性算符 $T + S$ 定义为

$$(T + S)(u) = T(u) + S(u) \quad (2.12)$$

同样, 对 V 上的任意 v , 我们用

$$(TS)(v) = T[S(v)] \quad (2.13)$$

定义两个线性算符的乘积. 现在, 我们只限于讨论有限维的矢量空间. 因此, 定义了加法和乘法运算的线性算符的集合就是复域上的一个代数.

假定 $e_1, e_2, \dots, e_n$ 是 V 的基, 令 T 是 V 上的线性算符. T 作用于 $e_1, \dots, e_n$, 我们得到

$$T(e_1) = \alpha_{11}e_1 + \cdots + \alpha_{1n}e_n$$

$$\dots\dots\dots$$

$$(2.14)$$

$$T(e_n) = \alpha_{n1}e_1 + \cdots + \alpha_{nn}e_n$$

这里 α_{ij} 是复数. 现在我们定义对基 e 的算符 T 的矩阵表示

$$[T]_e = (\alpha_{ji}) = \begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{21} & \cdots & \alpha_{n1} \\ \alpha_{12} & \alpha_{22} & \cdots & \alpha_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{1n} & \alpha_{2n} & \cdots & \alpha_{nn} \end{bmatrix} \quad (2.15)$$

注意, 线性算符的矩阵表示依赖于基的选择. 对于无限维矩阵, 可以像对有限维矩阵一样进行求和与相乘运算, 虽然当涉及到无限维求和时, 要注意收敛问题, 在量子力学中, 线性算符是非常重要的, 在下一章我们即将看到, 它们代表诸如能量、动量等物理量.

内积: V 上的内积 $\langle u, v \rangle$ 是从 $V \times V$ 到复数域的一种运算. (即把 V 上的每一对矢量映射为一个复数). 对 V 上的 u, v, u' 和 C 上的 α , 内积满足如下的条件:

$$\begin{aligned} (i) \quad & \langle u, v \rangle = \overline{\langle v, u \rangle} \\ (ii) \quad & \langle u + u', v \rangle = \langle u, v \rangle + \langle u', v \rangle \\ (iii) \quad & \langle \alpha u, v \rangle = \alpha \langle u, v \rangle \\ (iv) \quad & \langle u, u \rangle > 0, \text{ 如果 } u \neq 0 \end{aligned} \quad (2.16)$$

定义了内积的矢量空间称为内积空间.

我们可以用内积来表述一些有用的定义. 矢量 v 的模是

$$\|v\| = \sqrt{\langle v, v \rangle} \quad (2.17)$$

如果 $\|v\| = 1$, 那么就说 v 是单位矢量, 也说 v 被归一化了.

两个矢量 u 和 v 是正交的, 如果

$$\langle u, v \rangle = 0 \quad (2.18)$$

一组矢量 $\{u_i\}$ 是正交的, 如果任意一对两个不同的元素是正交的, 即 $\langle u_i, u_j \rangle = 0$, 当 $i \neq j$. 特别, 一组元素是正交的, 且每一个元素都是单位矢量, 可合并写为

$$\langle u_i, u_j \rangle = \delta_{ij} \quad (2.19)$$

这里, δ_{ij} 是 Kronecker δ 函数, 当 $i \neq j$ 时为 0, $i = j$ 时为 1. 量子力学中经常使用的一个重要结果是 Cauchy-Schwartz 不等式, 对所有矢量 u 和 v 都有

$$|\langle u, v \rangle| \leq \|u\| \cdot \|v\| \quad (2.20)$$

算符和标积: 假设 T 是 V 上的线性算符, 且 V 是标积空间, 可以证明有一个特别的线性算符, 记为 $T^\dagger$, 对 V 上任意的 u, v , 它满足

$$\langle Tu, v \rangle = \langle u, T^\dagger v \rangle \quad (2.21)$$

这个算符称为 T 的共轭算符. 如 $A = (\alpha_{ij})$ 是一个复数矩阵, $A^\dagger$ 被定义为 $A^\dagger = (\overline{\alpha_{ji}})$. 即, 它由 α_{ij} 交换哑指标并取复共轭构成. 如果 A 代表一个算符 T , 那么 $A^\dagger$ 代表算符 $T^\dagger$, 在这两种情况下使用同样的符号 $\dagger$. 如果 $T = T^\dagger$, 那么 T 被称为厄米算符或自共轭算符. 如果 $T = -T^\dagger$, 那么 T 称为反厄米算符. 如果 T 保持标积不变, 即对 V 上的任何 u, v , 都有 $\langle Tu, Tv \rangle = \langle u, v \rangle$,