

罗蓓玲 编著

量子力学

中山大学出版社

量 子 力 学

罗蓓玲 编著

中山大学出版社

量子力学

罗蓓玲 编著

中山大学出版社出版发行

广东省新华书店经销

山西省新华印刷厂印刷

850×1168毫米 32开本 14.125印张 35.4万字

1989年1月第1版 1989年1月第1次印刷

印数：1—2000册

ISBN7-306-00125-6

O·11 定价：3.35元

前 言

量子力学自1926年问世以来，作为微观世界物质运动的基本规律促使物理学萌发了原子物理、半导体物理、低温物……等许多新的分枝，并因此对电子物理学、生物学、哲学，甚至科学技术产生了极其深刻的影响。但量子力学的基本概念和基本原理和直觉的经验相矛盾，以致不易为人们所接受。作为大学物理系本科教材的量子力学不应回避上述困难，相反系统地、准确地予以阐明，以期读者的物理思维和习惯完成从宏观到微观的转变。因此，本书约以四分之一的篇幅从分析物理背景入手，系统地介绍了量子力学的基本原理，基本概念，以及彼此间的联系。最后总结成完整的理论体系。

40年代以来，固体物理由于广泛地应用了量子力学，取得了突破性的进展，这些成就在教材中也应有所反映，除在第四章介绍了固体能带论，朗道能级（量子霍尔效应原理）之外，还在第九章介绍了费米子二次量子化方法和格波的正则量子化方法，以后只要补充格林函数，便可在量子力学的框架中，用场论的方法处理量子统计物理及凝聚态物理。

代数方法是矩阵力学保留在量子力学中的精华部分，和波动力学的微分方法互相补充，应该加强代数方法的训练。为此，从第六章开始介绍了一些典型的代数求解的方法，如正则量子化方法，角动量算子和本征谱以及磁共振的代数求解法。并在习题中相应加强。

全书自始至终强调物理概念，物理图象，无论推导公式或举例应用，坚持从分析物理背景开始，在运算过程中以物理分析为

指导，将结论描述成物理图象，举例偏重选择量子力学发展史上重大题材，少量理想模型都对其物理原型作了说明。

此外，对散射理论作了调整，在第四和第八章分别用定态和量子跃迁方法处理，既可突出散射过程的实质，又可揭露散射振幅和束缚态能级的联系。这是60年代粒子理论中风靡一时的色散关系的出发点。

全书共分九章：量子力学基础；力学量的基本理论；态随时间变化的规律；简单定态问题；定态微扰论；表象理论和代数方法；自旋和角动量；量子跃迁理论；多体问题。可为进一步学习高等量子力学打下坚实的基础，适用于物理系本科教材，物理系教师和硕士生的参考书。

由于印刷条件限制，全书普朗克常数 $\hbar = 1.06 \times 10^{-27} \text{erg} \cdot \text{sec}$ 用 h 表示

本书是编者多年在中山大学物理系讲授量子力学自编教材，部分内容作为编者在中山大学物理系为研究生讲授高等量子力学时的补充教材。

本书在出版过程中得到骆益祥同志的帮助，谨此致谢。

不当之处，希广大教师和读者们批评指正。

编者 1988年6月于广州

目 录

第一章 量子力学基础	(1)
§ 1 经典物理的困难	(1)
§ 2 粒子的波动性	(3)
光的二重性	(3)
德布洛意 (L.de Broglie) 物质波假设	(5)
电子衍射实验——物质波假设的证明	(6)
微观粒子的二重性——微弱电流衍射实验	(8)
§ 3 波函数的统计解释——坐标平均值	(10)
波函数的统计解释	(10)
空间分布几率密度	(12)
波函数的归一化	(13)
粒子坐标函数的平均值	(14)
§ 4 态叠加原理	(16)
态叠加原理	(16)
粒子的动量分布几率	(18)
粒子动量函数的平均值及动量算符	(21)
§ 5 微观粒子的动量和坐标的测定——测不准关系	(24)
测不准关系	(24)
轨道运动是可能吗	(26)
对测不准关系的解释	(27)
习 题	(28)
第二章 力学量的基本理论	(31)
§ 1 用线性自轭算子来表示力学量	(32)
力学量算子	(32)

线性自轭算子的意义	(34)
算子的运算规则	(37)
平均平方差的普遍公式	(39)
§ 2 本征值和本征函数	(39)
平均值和可能值	(39)
本征值和本征函数	(41)
坐标和动量的本征值和本征函数	(43)
§ 3 力学量几率分布的公式	(44)
本征函数集的正交完备定理	(44)
力学量谱与本征谱	(47)
几率的普遍公式	(47)
§ 4 完全力学量各种力学量可以同时测量的条件	(49)
完全力学量	(49)
各种力学量可以同时测量的条件	(51)
§ 5 轨道角动量的本征值和本征函数	(56)
轨道角动量算子及其对易关系	(58)
轨道角动量算子的极坐标形式	(61)
轨道角动量的本征值和本征函数	(64)
习 题	(68)
第三章 态随时间变化的规律	(70)
§ 1 薛定格 (Schrödinger) 方程式	(71)
薛定格方程式	(71)
几率守恒定律及连续方程式	(74)
§ 2 定态	(79)
§ 3 力学量对时间微商的算子	(83)
力学量对时间微商的算子	(83)
运动积分	(85)
运动常数与定态	(88)
§ 4 量子力学中的牛顿方程式	(92)

量子力学中的牛顿方程式·····	(92)
量子力学近似为牛顿力学的条件·····	(95)
习 题 ·····	(98)
第四章 简单定态问题 ·····	(100)
§ 1 隧道效应 ·····	(100)
一维方势垒·····	(102)
穿透几率与反射几率·····	(105)
任意形状势垒的隧道效应·····	(108)
三角势垒的隧道效应·····	(110)
§ 2 粒子在中心场中的运动 ·····	(112)
径向波函数的运动方程式·····	(112)
空间球对称与能量的简并·····	(113)
束缚态及其能谱·····	(114)
散射态及相移·····	(116)
散射相移与束缚态能谱的关系·····	(120)
§ 3 电子在库伦场中的运动 ·····	(122)
§ 4 原子中的电荷分布及磁矩 ·····	(129)
原子中的电荷分布·····	(129)
原子中的磁矩·····	(137)
§ 5 一维谐振子与双原子分子 ·····	(139)
二体系运动的描述——质心运动和相对运动·····	(140)
由双原子定态方程式到谐振子的定态方程式·····	(144)
一维谐振子的能谱及定态波函数·····	(148)
双原子分子·····	(152)
§ 6 固体中的能带 ·····	(153)
电子的共有化运动·····	(153)
一维直角周期场模型·····	(154)
速度与波矢量及能量的关系——有效质量·····	(160)
§ 7 定态的散射理论·····	(163)

散射截面	(164)
散射截面公式	(165)
分波截面公式	(168)
分波近似与相移分析	(172)
§ 8 球对称的直角势阱的散射	(176)
§ 9 库伦势散射	(181)
散射态的径向波函数	(181)
分波相移	(184)
分波散射振幅的极点和束缚态能谱	(186)
§ 10 在均匀磁场下二维带电粒子的运动 (中心对称解 和规范不变性)	(188)
中心对称解	(190)
运动的特点	(196)
规范不变性	(199)
§ 11 朗道能级	(203)
朗道能级及其本征态	(203)
运动的特点	(205)
相互正交的均匀电磁场中带电粒子的二维运动	(208)
习 题	(210)
第五章 定态微扰论	(215)
§ 1 能级简并时的微扰论	(215)
微扰论大意	(216)
零级近似波函数	(218)
H_0 表象中各级微扰修正方程式	(219)
正确零级近似波函数的条件	(222)
解一级修正方程式	(224)
解二级修正方程式	(225)
非简并情形下的微扰论	(228)
§ 2 斯塔克 (Starke) 效应	(229)
碱金属原子的斯塔克效应	(231)

氢原子的斯塔克效应	(231)
习 题	(235)
第六章 表象的基本理论和量子力学中的代数方法	(237)
§ 1 波函数的矩阵形式	(239)
态叠加原理和态矢量	(239)
狄拉克符号的运算规则	(241)
态矢量和分布几率	(242)
§ 2 力学量算子的矩阵形式	(242)
用自轭矩阵表示力学量	(243)
在任意表象中力学量平均值的公式	(245)
任意表象中的本征方程式	(246)
任意表象中的薛定格方程式	(247)
密度矩阵	(248)
§ 3 表象变换	(249)
§ 4 海森堡绘景	(253)
海森堡绘景下的波函数	(253)
海森堡绘景中的力学量算子	(255)
海森堡绘景中的运动方程式——量子力学牛顿方程式	(257)
§ 5 正则量子化——一维谐振子	(259)
谐振子的量子力学牛顿方程式的解	(260)
测不准关系和 C, C^+ 算子	(263)
谐振子的能谱	(265)
正则量子化的局限	(266)
习 题	(268)
第七章 电子自旋及角动量	(270)
§ 1 电子自旋算子和自旋态	(270)
自旋的本征值与自旋算子的对易关系	(271)
m_s 的计算子和降算子 $\hat{S}_\pm$	(273)
S_z 表象中电子的自旋波函数及算子	(277)

泡里矩阵.....	(278)
$l_z = 1, \frac{3}{2}$ -时自旋算子	(279)
§ 2 电子的波函数及力学量算子	(281)
电子波函数的表达式	(281)
电子的力学量算子	(282)
泡里方程式	(283)
§ 3 角动量的相加	(284)
总角动量的对易关系和本征谱	(284)
总角动量的本征函数	(285)
推广	(290)
§ 4 碱金属原子能级的精细结构	(292)
§ 5 蔡曼 (Zeeman) 效应	(296)
复杂的蔡曼效应	(298)
铂邢-巴克效应	(300)
§ 6 磁场中的自旋运动	(303)
均匀稳定磁场下自旋的运动和半经典的矢量模型	(304)
磁共振理论	(308)
习 题	(313)
第八章 量子跃迁理论	(316)
§ 1 量子跃迁概念	(316)
§ 2 量子跃迁的微扰理论	(319)
微扰论中的薛定格方程式	(319)
互作用绘景	(321)
互作用绘景中的U阵理论	(326)
§ 3 周期性微扰与常微扰	(328)
突然接通的作用	(329)
末态的本征谱连续时的每秒跃迁几率	(333)
绝热近似	(334)

§ 4	原子的受激辐射和光的吸收 (电偶极作用)	(335)
§ 5	爱因斯坦辐射理论	(341)
	爱因斯坦自发辐射理论	(341)
	自发辐射总几率和激发态的寿命	(344)
	辐射强度和对应原则	(347)
§ 6	原子的电偶极辐射选择定则	(347)
§ 7	散射问题	(354)
	散射截面的玻恩近似公式	(354)
	高速带电粒子对原子的弹性散射	(359)
§ 8	光电效应	(363)
	习 题	(369)
第九章	量子力学多体问题	(373)
§ 1	描述多体系的波函数力学量算子和薛定格方程式 ..	(374)
	多体系的状态波函数	(374)
	力学量算子和本征函数	(374)
	多粒子系统的薛定格方程式	(375)
§ 2	质心坐标系	(376)
	雅可俾坐标变换	(376)
	质心坐标系	(379)
	例	(382)
§ 3	全同性原理	(384)
	全同粒子多体系哈密顿算子的对称性	(384)
	薛定格方程式的对称性	(385)
	全同原理	(386)
§ 4	泡里原理——费米子和玻色子	(389)
	P_{jk} 的本征值及其物理意义	(389)
	泡里原理——费米子和玻色子	(391)
§ 5	氦原子问题	(393)
	正氦和仲氦	(393)

交换能.....	(395)
用变分法近似计算氢原子基态.....	(397)
§ 6 反对称波函数.....	(402)
全反对称波函数.....	(402)
对称波函数.....	(405)
质心坐标系中的对称和反对称波函数.....	(407)
§ 7 二次量子化.....	(410)
粒子数表象的算子.....	(410)
二次量子化.....	(416)
吸收算子和产生算子间的对易关系.....	(417)
薛定格方程式的二次量子化形式.....	(419)
§ 8 哈特里 (Hartree) —— 福克 (Φ OK) 方程.....	(421)
薛定格方程式的图解.....	(421)
哈特里——福克近似.....	(422)
福克方程.....	(423)
哈特里方程.....	(426)
§ 9 晶格运动与声子.....	(427)
量子力学运动方程式.....	(430)
测不准关系及正则量子化.....	(433)
格波的能级和声子.....	(435)
习 题.....	(438)

第一章 量子力学基础

§ 1 经典物理的困难

在普通物理课程中，大家已学过了的力学、电磁学、光学、热学和分子物理学等，都早在二十世纪之前就已创立。因此都称为经典物理或古典物理。由于生产和科学技术水平的限制，在二十世纪以前还没有可能开展对原子结构的研究，所以古典物理的规律都是对尺度远大于原子的宏观世界中物理现象的总结；经典物理的理论是宏观世界的物理理论。到了二十世纪初，随着物理实验技术不断地改善，物理学逐渐深入到微观世界的研究，特别是关于光和物质的相互作用，原子结构的研究，发现了许多无法用经典物理解释的新现象，例如：黑体辐射、光电效应、康普敦（A.H.Compton）效应、原子的“有核”模型结构、原子能量和角动量的量子化、低温下固体的比热和金属的电导…等。都为量子力学的建立提供了实验基础。这一节中，我们主要讨论经典物理在原子结构方面遇到的困难。至于其他困难，有些已在普通物理中介绍过，有些将要在固体物理中详细谈到，因此从略。

二十世纪初，卢瑟福（E.Rutherford）观察由放射性元素衰变出来的 α 粒子通过金属箔后的散射现象探讨原子结构，发现原子中心是一个质量很大（几乎等于整个原子质量），体积很小（半径 $10^{-12} - 10^{-13}$ cm）带正电的原子核，电子分布在核外。为了解释电子不致因受原子核正电荷的吸引而落到原子核内，假设电子绕原子核运动，这就是原子的核式模型。在原子光谱的研

究基础上, 1913年玻尔 (N. Bohr) 又进一步指出原子内电子的能量是一系列分立的数值。以氢原子为例, 分析氢原子光谱, 发现氢原子中电子的能量是下面一系列不连续的数值

$$E_n = -2\pi hcR \frac{1}{n^2} \quad n=1, 2 \cdots \text{整数} \quad (1-1)$$

其中 $h=1.05 \times 10^{-27} \text{ erg} \cdot \text{sec}$ [注] 是普朗克 (Planck) 常数, $R=1.096776 \text{ cm}^{-1}$ 是黎德堡常数, 这就是所谓能量量子化。

原子的有核模型及能量量子化现象是对古典物理的挑战, 遵照经典力学规律, 当电子处在原子核的静电场中时, 受到库伦引力作用

$$\vec{F} = -\frac{Ze^2}{r^3} \vec{r} \quad (1-2)$$

其中 Z 是原子序数, $\vec{r}$ 是由原子核到电子间距离。若 $\vec{F}$ 作为向心力, 核外电子可作最简单的等速圆周运动, 其轨道半径 R 与速率 v 的关系是

$$\frac{\mu v^2}{R} = \left| \vec{F} \right| = \frac{Ze^2}{R^2} \quad (1-3)$$

其中 μ 是电子质量, 由此得到总能 E 与 R 的关系是

$$E = \frac{1}{2} \mu v^2 - \frac{Ze^2}{R} = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{R} \quad (1-4)$$

所以能量量子化要求电子运动轨道半径必须也取一系列分立的数值。这是经典力学所无法解释的。玻尔虽然人为地引入量子化条件, 但是这种建立在经典理论基础上的玻尔-索莫菲理论应用到多电子原子时与实验不符, 特别是不能解释角动量的实验值。

上面的讨论仅考虑了原子核静电场对电子的作用, 若进一步考虑到加速运动的电子会辐射电磁波, 那么原子的有核模型便指

注: 因受印刷水平限制, 只得将 $\hbar$ 印成 h , 以下类同

出：在原子世界中，经典物理完全是错误的。因圆周运动是一种加速运动。加速运动的电子相当于不稳定的电流和电荷，必定辐射电磁波。所以绕原子核运动的电子不断辐射电磁场而不断地失去能量。另一方面由(1-4)可知：随着能量 E 的减少，圆周运动轨道的半径 R 也相应缩小，最后电子必然落入原子核之中。据估计电子从原来的轨道落入原子核只需 10^{-8}sec ，这就等于说原子的核式模型实际上不可能存在，这又与 α 粒子散射实验矛盾。

由原子光谱精细结构还可推测出：原子中的电子有角动量 $\vec{M} = 0$ 的运动状态，这又是经典力学所无法解释的。因为

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (1-5)$$

有二种情形可能使得 $\vec{M} = 0$ ，一种是 $\vec{p} = 0$ ，即电子是静止的，此时电子因受原子核的吸引力作用而落进原子核，并且和原子核的正电荷中和，不再成为原子，所以不可能 $\vec{p} = 0$ 。第二种情形是 $\vec{p} \parallel \vec{r}$ ，即电子是沿原子半径作直线运动，此时电子也会落到原子核内和正电荷中和，也不再成为原子。所以经典力学在解释原子中电子的角动量时又遇到了无法克服的困难。

总之，关于原子结构的实验困惑了物理学家：原子中电子的运动根本不遵从经典力学的规律，新的运动规律又将是怎样？

§ 2 粒子的波动性

2.1 光的二重性

既然，原子中电子运动并不遵从古典力学的规律。那么，应该遵从什么规律？就人类认识运动的秩序说来，总是由认识个别和特殊的事物，然后逐步地扩大到认识一般的事物。人们对于微观世界中粒子运动规律的认识正是从光的二重性开始。因此，在这里先简单复习一下光的二重性。

古典物理认为光和粒子是两种性质完全不同的物质。研究光的各种传播现象如干涉、衍射、折射、反射和偏振等实验，认识到可见光是一种波长约为 10^{-4}cm 的电磁波。在古典物理概念中，一个作波动的物质，它的结构不可能是单个的质点，一定是连续体。如形成水波的水，产生声波的空气等都是连续体，光波既然是电磁场的振动，经典电动力学告诉我们电磁场也是连续体。另一方面，电子和原子核等都是体积极其小(半径约为 10^{-13}cm) 的物质。因此，在古典力学看来，如不研究粒子内部的运动，粒子可近似地看成质点，只能作轨道运动。所以依照经典物理学概念，光和粒子的差异可列表如下：

	光	粒 子
结构	是连续体 可以机械分割	体积极小的物质 不能机械分割
运动	波动	轨道运动

到了二十世纪，进一步研究带电物质吸收和辐射光的现象，如黑体辐射、光电效应，康普敦效应。发现了：(1) 一束光实际上是由许多分立的粒子所组成，这种粒子被叫做光子。(2) 在一束圆频率是 ω ，波矢量是 $\vec{k}$ 的光束中，光子的能量 E 和动量 $\vec{p}$ 分别为

$$E = h\omega \quad (2-1)$$

$$\vec{p} = h\vec{k} \quad (2-2)$$

(3) 光的强弱和光子的数量有关。光愈强，光子数量愈多；光愈弱，光子的数量也愈少。这就是说光波的振幅与光子数量有关。这就是光的二象性或二重性。