



国家出版基金项目
NATIONAL PUBLICATION FOUNDATION



现代原子核物理

高等量子力学



马中玉 张竞上 编著

HEUP 哈尔滨工程大学出版社

2013 年度国家出版基金项目“现代原子核物理”

高等量子力学

马中玉 张竞上 编著

 哈尔滨工程大学出版社

内 容 简 介

本书是为核物理及相关领域的研究生编写的高等量子力学教程。全书分七章,主要内容为:量子系统的描述、角动量理论、量子理论中的对称性和守恒定律、转动矩阵和约化矩阵元、量子散射理论、量子碰撞形式理论、相对论量子力学简介。在附录中给出了习题解;Schrödinger 方程的变量分离、球谐函数和 Legendre 多项式、球 Bessel 函数及其渐近行为、库仑场中带电粒子的运动和库仑场中 Dirac 方程的束缚态解。

本书可供核物理及相关专业的研究生教学使用。

图书在版编目(CIP)数据

高等量子力学 / 马中玉, 张竞上编著. —哈尔滨:
哈尔滨工程大学出版社, 2013. 12
ISBN 978 - 7 - 5661 - 0714 - 5

I. ①高… II. ①马… ②张… III. ①量子力学 - 研
究生 - 教材 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2013)第 299732 号



出版发行 哈尔滨工程大学出版社
社 址 哈尔滨市东大直街 124 号
邮政编码 150001
发行电话 0451 - 82519328
传 真 0451 - 82519699
经 销 新华书店
印 刷 哈尔滨市石桥印务有限公司
开 本 787mm × 1 092mm 1/16
印 张 12.5
字 数 309 千字
版 次 2013 年 12 月第 1 版
印 次 2013 年 12 月第 1 次印刷
定 价 70.00 元

<http://www.hrbeupress.com>

E-mail: heupress@hrbeu.edu.cn

序 言

原子核物理学(简称核物理学、核物理或核子物理)是20世纪新建立的一个物理学学科,是研究原子核的结构及其反应变化的运动规律的物理学分支。它主要有三大领域:研究各类次原子粒子与它们之间的关系、分类与分析原子核的结构,并带动相应的核子技术进展。原子核物理的研究内容包括核的基本性质、放射性、核辐射测量、核力、核衰变、核结构、核反应、中子物理、核裂变和聚变、亚核子物理和天体物理等。它研究原子核的结构和变化规律,射线束的产生、探测和分析技术,以及同核能、核技术应用有关的物理问题。

原子核物理内容丰富多彩,是物理学非常活跃的研究领域,一百多年来共有七十多位科学家因原子核物理领域的优异成绩而获得诺贝尔奖。并且原子核物理是一个国际上竞争十分激烈的科技领域,各国都投入大量人力、物力从事这方面的研究工作。它是一门既有深刻理论意义,又有重大实践意义的学科。

在原子核物理学产生、壮大和巩固的全过程中,通过核技术的应用,核物理与其他学科及生产、医疗、军事等领域建立了广泛的联系,取得了有力的支持。核物理基础研究又为核技术的应用不断开辟新的途径。人工制备的各种同位素的应用已遍及理工农医各部门。新的核技术,如核磁共振、穆斯堡尔谱学、晶体的沟道效应和阻塞效应,以及扰动角关联技术等都迅速得到应用。核技术的广泛应用已成为科学技术现代化的标志之一。

核物理的发展,不断地为核能装置的设计提供日益精确的数据,从而提高了核能利用的效率和经济指标,并为更大规模的核能利用准备了条件。截至2013年3月,全世界有30多个国家运行着435座核电机组,总净装机容量为374.1 GW,核能的发展必将为改善我国环境现状作出重要贡献。

“现代原子核物理”出版项目的内容包括激光核物理、工程核物理、核辐射监测与防护等理论与技术研究的诸多方面。该项目汇集和整理了我国现代原子核物理领域最新的一流水平的研究成果,是我国该领域的科学研究、技术开发的一个系统全面的出版项目。

值得称道的是,“现代原子核物理”项目汇集了国内核物理领域的多位知名学者、专家毕生从事核物理研究所积累的学术成果、经验和智慧,将有助于我国核物理领域的高水平人才培养,并进一步推动核物理有关课题研究水平的提高,促进我国核物理科学研究向更高层次发展。该项目的出版将有助于推动我国该领域整体实力的进一步提高,缩短我国与国外的差距,使我国现代原子核物理研究达到国际先进水平。

该系列丛书较之已出版过的同类书籍和教材,在内容组成、适用范围、写作特点上均有明显改进,内容突出创新和当今最新研究成果,学术水平高,实用性强,体系结构完整。“现

代原子核物理”将是我国该领域的一个优秀出版工程项目,她的出版对我国现代原子核物理研究的发展有重要的价值。

该系列丛书的出版,必将对我国原子核物理领域的知识积累和传承、研究成果推广应用、我国现代原子核物理领域高层次人才培养、我国该领域整体研究能力提高与研究向更深与更高水平发展、缩短与国外差距、达到国际先进水平有重要的指导意义和促进作用。

我衷心地祝贺“原子核物理”项目成功立项出版。



中国工程院院士
中核集团科技委主任
二〇一三年十月

前 言

本书是为核物理及相关领域的研究生编写的高等量子力学教程。物理专业的学生在大学课程中已经学习了量子力学,具备了初步的量子力学知识,通过这门课程的学习,达到巩固和掌握量子力学的基本原理,学习用量子力学方法描述核物理问题,为开展核物理及相关领域的研究准备基础理论方法。

本书主要参考 P. Romen《Advanced Quantum Theory》, A. R. Edmonds《Angular Momentum in Quantum Mechanics》, M. E. Rose《Relativistic Electron Theory》和周世勋的《量子力学教程》等高等量子力学和相关问题研究的经典书籍,同时作者基于多年开展核物理理论研究的积累,为核工业总公司研究生部物理专业的研究生编写的教材。作者在多年的教学中,对本书做了多次修改。量子力学课程需要较多的数学知识,为了便于学生学习,在书中给出了较为详细的推导,与课程有关的一些数学知识也在附录中给出。深入理解和巩固量子力学的物理知识和学习解决实际问题的方法,需要尽量多做习题练习,我们在每章的最后列出了习题,并在附录中给出了习题解。

全书共分七章,第1章:量子系统的描述,回顾了非相对论量子力学的基本原理,量子力学与经典力学的关系,量子系统随时间变化的几种绘景描述,全同粒子的描述和二次量子化理论简介。第2章:角动量理论,介绍了角动量算符的本征值和矩阵表示,两个角动量耦合的 Clebsch - Gordon 系数,三个角动量耦合的 Racah 系数以及四个角动量耦合的 $9-j$ 系数,各种耦合系数的对称性。第3章:量子理论中的对称性和守恒定律,介绍了波函数变换的一般性讨论,量子系统中对称性与物理量守恒之间的关系,空间平移、时间平移、空间转动、空间反射、时间反演变换下量子系统不变性以及对应物理量的守恒定律。第4章:转动矩阵和约化矩阵元,介绍了转动算符的矩阵表示,转动矩阵的正交性和耦合规则,不可约张量算符的概念和在空间转动下的性质,不可约张量算符的约化矩阵元——Wigner - Eckart 定理。第5章:量子散射理论,介绍在非相对论情况下粒子在势场下的散射理论,主要包括弹性散射的波恩近似和相移理论计算方法,共振散射,复势散射,吸收过程,全同粒子散射和极化散射的量子力学理论描述。第6章:量子碰撞的形式理论,介绍弹性散射的严格形式解,包括 T 矩阵理论,Green 函数的 Dyson 方程的基本知识;非弹性散射的形式理论和重整碰撞理论等量子力学知识。第7章:相对论量子力学简介,介绍了在相对论情况下量子力学中波函数满足的方程表示形式,Dirac 方程的建立,Dirac 方程中有关算符的表示和性质,由 Dirac 方程平面波解得到的 Dirac 方程的三维解的物理含义,以及粒子空穴理论和反粒子等物理内容。Dirac 方程 Lorentz 变换的协变性和 Dirac 方程的径向方程的表示,并以库仑解来理解相对论量子力学的应用及其局限性。在附录中给出了习题解;Schrödinger 方程的变量分离;球谐函数和 Legendre 多项式;Bessel 函数及其渐近行为;库仑场中带电粒子的运动和库仑场中 Dirac 方程的束缚态解。

本书的多次修改和出版得到了核工业研究生部领导的鼓励、支持和帮助,我们在此表示感谢。

编 者

2013 年 3 月

目 录

第 1 章 量子系统的描述	1
1.1 前言	1
1.2 非相对论量子力学的基本原理	2
1.3 量子力学与经典力学的关系	8
1.4 量子系统随时间变化的绘景描述	10
1.5 全同粒子系统的描述	14
1.6 二次量子化基础理论知识——粒子数表象	17
1.7 习题	21
第 2 章 角动量理论	23
2.1 角动量算符的本征值及矩阵表示	23
2.2 两个角动量耦合 Clebsch – Gordon 系数	27
2.3 三个角动量耦合——Racah 系数	34
2.4 四个角动量的耦合 $9-j$ 符号	38
2.5 习题	40
第 3 章 量子理论中的对称性和守恒定律	41
3.1 量子系统中对称性的一般讨论	41
3.2 对称性与守恒定律	44
3.3 位形空间平移不变性与动量守恒	45
3.4 时间平移不变性与能量守恒	46
3.5 转动不变性与角动量守恒	47
3.6 空间反射不变性与宇称守恒	49
3.7 时间反演不变性和超选择定律	51
3.8 习题	54
第 4 章 转动矩阵和约化矩阵元	55
4.1 转动算符的矩阵表示—— D 函数	55
4.2 空间转动的 Euler 角和转动矩阵 D 函数的性质	55
4.3 转动矩阵的正交归一性和耦合规则	57
4.4 D 函数的积分性质	58
4.5 D 函数与球谐函数的关系	59
4.6 球基坐标	60
4.7 不可约张量算符	62
4.8 不可约张量算符的约化矩阵元——Wigner – Eckart 定理	65
4.9 习题	68

第 5 章 量子散射理论	70
5.1 引言	70
5.2 散射微分截面的坐标系变换	71
5.3 无自旋粒子在势场中的散射	73
5.4 Born 近似和 Born 近似的适用条件	75
5.5 粒子在球对称场中散射的分波法	81
5.6 散射长度和有效力程	88
5.7 散射相移的计算方法	90
5.8 共振散射	95
5.9 复势散射, 吸收过程	98
5.10 自旋为 $1/2$ 粒子的散射	100
5.11 无极化情况下弹性散射截面的 Legendre 多项式展开	106
5.12 全同粒子的散射	108
5.13 习题	111
第 6 章 量子碰撞形式理论	112
6.1 引言	112
6.2 弹性散射严格解——Lippmann - Schwinger 方程	112
6.3 非弹性碰撞的形式理论	115
6.4 重整碰撞(Rearrangement collision)理论	117
第 7 章 相对论量子力学简介	120
7.1 Klein - Gorden 方程	120
7.2 Dirac 方程的建立	122
7.3 Dirac 方程中算符 α_i 和 β 的性质和 γ 矩阵	123
7.4 Dirac 方程的平面波解	126
7.5 Dirac 方程 Lorentz 变换的协变性	131
7.6 由 $\bar{\psi}, \psi$ 和 γ_μ 矩阵组成的协变量	137
7.7 在电磁场相互作用下的 Dirac 方程——电子的磁矩	139
7.8 中心场中 Dirac 方程的径向方程	141
7.9 类氢原子能级的精细结构	146
7.10 习题	149
附录 1 习题解	150
附录 2 Schrödinger 方程的变量分离	168
附录 3 球谐函数和 Legendre 多项式	172
附录 4 球 Bessel 函数及其渐近行为	175
附录 5 库仑场中带电粒子的运动	179
附录 6 库仑场中 Dirac 方程的束缚态解	185
参考文献	189

第1章 量子系统的描述

1.1 前言

1871年,俄国化学家门捷列夫(D. I. Mendelyev)将化学元素排列成元素周期表。化学反应是不同元素的原子重新组合,当时元素周期表中尚有未被发现的元素,但是门捷列夫预言了它们的化学性质,后来被逐一发现,验证了门捷列夫周期表的预言性,所有物质都是由“至小无内”的九十多种原子构成^①。但是在19世纪末,一些新物理现象的出现对此提出了挑战。德国伦琴(W. Röntgen)在阴极射线实验中发现了照相底片被曝光,当时不知何物,称为X射线。1896年,法国贝克勒尔(A. H. Becquerel)发现硫酸钾铀也可以发出X射线,首次提出放射性概念。继而在1897年英国汤姆孙(J. J. Thomson)测出阴极射线的电荷质量比,称这种带电的粒子为电子。以上三大发现均来自原子内部信息,认识到原子也是有内部结构的。居里(M. Curie)夫人提炼的镭和钋具有更强的放射性,1899年卢瑟福(E. Rutherford)发现两种放射线 α 和 β ,维拉德(P. V. Villard)发现第三种射线 γ 。从此之后物理学界就着手开始研究原子内部结构。其后,众学者提出原子结构的两种模型:一种是“云状模型”,认为原子内部是正负电荷均匀分布的微粒结构;而另一种是“行星系模型”,认为正电荷处于核心,负电荷电子分布在核心周围,类似于太阳系结构。1911年,卢瑟福用 α 粒子散射实验,证实了原子确实有一个尺寸很小,但质量很大的核心,它占整个原子质量的99.99%,称为原子核。原子核外为电子。1912年,莫斯莱(A. Meshan)实验证明,原子核的正电荷数与核外电子数相等,两者电荷符号相反,形成原子的电中性。这个电荷数正好对应元素周期表序号。受微观粒子波粒二重性的启发,创建了微观世界动力学——量子力学。薛定谔(E. Schrödinger),海森堡(W. Heisenberg),玻恩(M. Born),狄拉克(P. A. M. Dirac),约旦(P. Jordan),泡利(W. Pauli)等人做出了重要贡献。量子力学新学说的建立,突破了经典力学的理论框架。

这个理论发展史说明,“科学没有永恒的理论,一个理论所预言的论据常常被实验所推翻,任何一个理论都有它的逐渐发展和成功的时期,经过这个时期后,它就很快地衰落。”——爱因斯坦(A. Einstein)《物理学的进化》1938年)^②。

量子理论成功地解释了元素周期表,门捷列夫知其然,量子理论知其所以然,并且提出了同位素的存在:在元素周期表每个元素格内可以存在数目不等的稳定和不稳定同位素。量子力学的创建是20世纪物理学方面最伟大的成就之一,它对微观世界给出了与经典物理截然不同的描述方式,因此比较完美地解释了经典物理所不能解释的微观世界物理图像。所以,要对微观世界的自身规律进行研究时,必须学习量子力学。量子力学是一门基础性学科,要学习的是量子理论的基本原理和解决物理问题的方法,以及相关的数学知识,为

① 中国战国时期哲学家惠施提出物质是由“至小无内,谓之小一”的微粒组成,是中国第一个古代原子论。

② A. 爱因斯坦, L. 英费尔德著. 物理学的进化. 周肇威译. 上海科学出版社, 1962。

今后学习相关的专业性课程奠定必需的理论基础。

本章首先复习量子力学的基本原理,量子力学与经典力学不同的特性,量子力学与经典力学的对应关系,并且介绍量子系统随时间变化所满足的方程。这种方程可以有三种绘景的描述方式,以及它们之间的内涵联系。根据不同的绘景的特性,它们应用于不同的物理问题。本章将给出全同粒子的量子力学描述方法和二次量子化理论简介。

1.2 非相对论量子力学的基本原理

在经典力学取得重大成就时,人们发现了一些新的物理现象,例如黑体、光电效应、原子光谱的分立线系等,这些物理现象都是经典物理理论所无法解释的,这就显示出经典物理的局限性。任何物体都能发射电磁波,同时也能吸收外来的电磁波。所谓黑体是指能吸收到达该物体表面的全部电磁波的物体,它的热辐射的能力也最强。1899 年瑞利 - 金斯 (Rayleigh - Jeans) 根据经典电动力学和统计物理学导出的描述黑体辐射频谱的瑞利 - 金斯公式

$$E_{\nu} d\nu = \frac{8\pi}{c^3} kT \nu^2 d\nu$$

式中 ν 是辐射频率; k 是波耳兹曼 (Boltzman) 常数; c 是光速; T 是温度。

这个公式与实验值比较,在低频端符合得很好,但在高频端与实验完全不符,而且趋向发散,计算出的辐射总能量趋于无穷大。这个结果是对经典物理学的一个灾难性打击,被称为“紫外发散困难”。1900 年,德国科学家普朗克 (M. Planck) 提出了量子论,假设频率为 ν 的电磁振动在能量转化时不是连续变化,吸收或发射只能以“量子”方式进行,能量单位为 $E = h\nu = \hbar\omega$, h 是普适常数,称为普朗克常数 ($h = 6.626176 \times 10^{-27}$ 尔格·秒, $\hbar = h/2\pi$)。由此假设导出了一个黑体辐射频谱公式

$$E_{\nu} d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

由图 1.1 所示,普朗克的黑体辐射频谱公式与实验值得到非常好的符合。黑体辐射和光电效应使人们发现光的波粒二象性。后来,1900 年被确定为量子力学诞生之年。

“当一个理论在很顺利地发展时,突然会发生一些出乎意料的阻碍,这种困难在科学上常常发生。有时把旧的观念加以简单推广似乎是一个解决困难的好方法。可是那旧理论往往已无法弥补,而困难终于使它垮台,于是新的理论随之兴起。”——爱因斯坦(《物理学的进化》1938 年)

虽然普朗克常数是一个非常小的量,但是微观世界物理现象的解释都与它有关。所有与普朗克常数 h 有关的问题称为量子效应。光电效应、康普顿效应 (Compton effect) 都是在光的粒子性的基础上得以解释的,但电子的干涉实验的结果表明,电子从双缝的衍射图形与 X 射线的衍射图形完全相似。电子既不是经典粒子,也不是经典的波,电子是微观世界粒子,具有波粒二象性。这个波不再是经典概念下的波,粒子也不是经典概念下的粒子。在对微观世界新概念认识的基础上开始创建量子力学,量子力学是在 1923—1927 年发展起来的。经典力学、电动力学、量子力学和统计力学被称为四大力学。量子力学的建立,可以很好地描述原子、原子核的性质。特别是相对论量子力学的建立,为量子场论、粒子物理的发展奠定了基础。

量子力学与经典力学不同的特性有下面几种:

1. 波粒二象性

微观世界粒子的运动行为具有波粒二象性。1923年法国德布罗意(L. de Broglie)将微观粒子波粒二象性推广到整个微观世界,粒子能量为 $E = h\nu$, 波长为 $\lambda = h/p$ 。在微观世界中,由于没有轨道而言,因此用概率振幅来描述运动系统行为,概率振幅模的平方才是可观测到的物理量。这是与经典力学的根本不同之处。微观世界粒子的自由运动可以用平面波来描述,平面波的频率和波长与自由粒子的能量和动量由德布罗意关系联系起来。而在有外力场作用到微观运动粒子上时,粒子运动就不能用平面波描述,平面波被明显

扭曲,外力场作用越强,扭曲越严重。用来描述这个复杂振幅的波的函数称为波函数。由于微观世界是用波函数描述,因此开始曾被称为波动力学。物理系统是由希尔伯特空间(Hilbert space)的态向量 $|\psi\rangle$ 作为概率振幅来描述,系统处在 $\mathbf{r}$ 处的概率用它的概率密度 ρ 来确定,概率密度的定义为

$$\rho(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) \geq 0 \quad (1.2.1)$$

对稳定系统概率满足归一化条件:

$$\langle \psi | \psi \rangle = \int d\mathbf{r} \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \int |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (1.2.2)$$

在上述的意义下波函数可以有一个任意不确定的相角。

2. 用线性厄密算符描述力学量

与经典力学不同的是,在量子力学中物理上可观测量用线性厄密算符(Hermitian operator)来表示。例如:在位形空间中粒子能量和动量对应的算符分别为

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla \quad (1.2.3)$$

由于在量子力学中力学量是用算符描述,会出现许多在经典力学中没有的新物理内容,例如对易和反对易关系的出现等。

在不同表象中算符的表示是不同的,(1.2.3)式的能量和动量的算符表示是在坐标表象中的表示。当然,也可以用动量表象处理量子力学问题,这时动量和坐标算符分别为

$$\mathbf{p}, \quad \mathbf{r} \rightarrow i\hbar \nabla_p \quad (1.2.4)$$

下面的讨论中如果不特别提出,都是在坐标表象来处理各种问题。量子力学中所有力学量算符都是厄密的

$$\hat{O}^\dagger = \hat{O} \quad (1.2.5)$$

线性厄密算符有如下几个性质:

(1) 线性算符,若两个波函数用两个普通的数 C_1 和 C_2 叠加,算符的作用满足下面等式

$$\hat{O}(C_1\psi_1 + C_2\psi_2) = C_1\hat{O}\psi_1 + C_2\hat{O}\psi_2 \quad (1.2.6)$$

(2) 由线性代数的知识得知,厄密算符的本征值为实数。因为可观察的物理量都是实

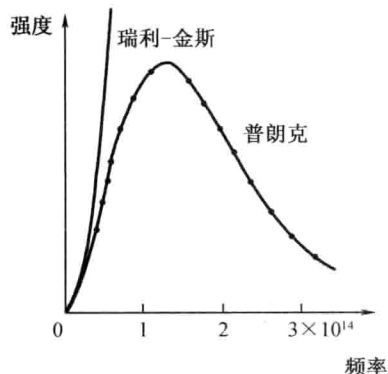


图 1.1 黑体辐射频谱图

的,只有厄密算符才能满足这个要求。

(3) 厄密算符的本征函数构成正交完备系,而本征函数具有如下性质:

正交性:

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{mn} \quad (1.2.7)$$

完备性:

$$\sum_n |\psi_n(\mathbf{r})\rangle \langle \psi_n(\mathbf{r}')| = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1.2.8)$$

这意味着对任意一个量子系统的波函数 $|\psi\rangle$, 可以用这些具有正交完备性的本征态展开

$$|\psi\rangle = \sum_n C_n |\psi_n\rangle \quad (1.2.9)$$

其中展开系数 C_n 是波函数在本征态 $|\psi_n\rangle$ 上的投影, $C_n = \langle \psi_n | \psi \rangle$, 用具有正交完备性的本征态展开也可推广到连续本征态

$$|\psi\rangle = \int d\mathbf{k} C_{\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle \quad (1.2.10)$$

自由粒子哈密顿量算符为 $\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2$, 这里 μ 为粒子的质量。在坐标表象中 $\hat{H}$ 的本征函数为

$$\varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{r}}{\hbar}\right) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (1.2.11)$$

物理上称其为平面波, 具有正交完备性, $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$ 称为波矢, 是一般的矢量, 不是算符。它的归

一化条件是 $\int \varphi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})^* \varphi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$, 任何波函数可以用平面波展开。

(4) 实验测量值由算符的期望值表示。在量子力学中, 粒子的运动是用波函数来描述的。在给定一个物理量的算符时, 实验观测到的值是由这个力学量算符对波函数的期望值给出

$$\bar{O} = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle \quad (1.2.12)$$

对不同运动体系波函数的行为是不同的, 因而力学量的期望值也是不同的。

3. 态叠加原理

当体系分别处于算符 $\hat{A}$ 的对应的本征值为 a_1 或 a_2 的本征态 $|\psi_1\rangle$ 或 $|\psi_2\rangle$ 时, 测量 $\hat{A}$ 物理量的准确结果分别为 a_1 和 a_2 , 令

$$a_1 = \langle \psi_1 | \hat{A} | \psi_1 \rangle, \quad a_2 = \langle \psi_2 | \hat{A} | \psi_2 \rangle$$

则在叠加状态 $|\psi\rangle = C_1 |\psi_1\rangle + C_2 |\psi_2\rangle$ 下测量 $\hat{A}$ 的结果也可能为 a_1 或 a_2 , 测量得到 a_1, a_2 的概率分别为 $|C_1|^2$ 与 $|C_2|^2$ 。在已知本征态 $|\psi_n\rangle$ 和相应的本征值 a_n 及 C_n 后可以得到在叠加状态下 ψ 的期望值为

$$\bar{A} = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \sum_n C_n \langle \psi | \hat{A} | \psi_n \rangle = \sum_n C_n a_n \langle \psi | \psi_n \rangle = \sum_n |C_n|^2 a_n \quad (1.2.13)$$

这就是概率叠加原理。

4. 波函数满足 Schrödinger 方程

系统随时间变化是由 Schrödinger 方程来描述的, Schrödinger 方程的一般形式为

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \hat{H}\psi \quad (1.2.14)$$

其中 $\hat{H}$ 为系统的 Hamiltonian 量, 由微观粒子的动能和位能两项组成, $\hat{H} = T + V$, 其中 T 为动能, V 为位能, ψ 是波函数。

通常实验的入射束为恒流, 整个核反应过程可以看成是定态过程。因此, 在量子力学中, 我们常处理的问题是解定态 Schrödinger 方程。定态 Schrödinger 方程的波函数的解表示为

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar} \quad (1.2.15)$$

代入方程(1.2.14)得到 $\psi(\mathbf{r})$ 满足的定态 Schrödinger 方程

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (1.2.16)$$

对于一个多粒子体系, 可以将能量分解为两个部分, 它们是整个体系质心运动能量和多粒子之间的相互作用能量, 又称为内禀能量。因此可以借助于相对运动坐标将其分解出来。以两粒子体系为例, 若入射粒子 a 的质量和坐标以及动量分别为 $m_a, \mathbf{r}_a, \mathbf{p}_a$, 靶核 A 的质量和坐标以及动量分别为 $m_A, \mathbf{r}_A, \mathbf{p}_A$, 体系的总质量是 $M = m_a + m_A$, 总动能为 $T = T_a + T_A$ 。当 a 与 A 的相互作用势仅是二者之间距离的函数时, 这时系统的哈密顿为

$$H = \frac{p_a^2}{2m_a} + \frac{p_A^2}{2m_A} + V(|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_a|) = -\frac{\hbar^2}{2m_a} \nabla_a^2 - \frac{\hbar^2}{2m_A} \nabla_A^2 + V(|\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_a|) \quad (1.2.17)$$

定义相对运动坐标 $\mathbf{r}$ 和质心运动坐标 $\mathbf{R}$ 分别为

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_A - \mathbf{r}_a \quad (1.2.18)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_a \mathbf{r}_a + m_A \mathbf{r}_A}{M} \quad (1.2.19)$$

利用上面相对运动坐标和质心运动坐标的定义, 得到下面的导数变换关系

$$\nabla_A = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_A} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_A} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} = \nabla_r + \frac{m_a}{M} \nabla_R$$

$$\nabla_a = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{r}_a} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{r}_a} \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} = -\nabla_r + \frac{m_A}{M} \nabla_R$$

可得质心运动动量 $\mathbf{P}$ 和相对运动动量 $\mathbf{p}$ 与 $\mathbf{p}_a$ 和 $\mathbf{p}_A$ 之间的关系

$$\begin{cases} \mathbf{p}_A = \frac{m_a}{M} \mathbf{P} + \mathbf{p} \\ \mathbf{p}_a = \frac{m_A}{M} \mathbf{P} - \mathbf{p} \end{cases} \quad (1.2.20)$$

以及逆关系

$$\begin{cases} \mathbf{P} = \mathbf{p}_a + \mathbf{p}_A \\ \mathbf{p} = \frac{m_a}{M} \mathbf{p}_A - \frac{m_A}{M} \mathbf{p}_a \end{cases} \quad (1.2.21)$$

在上述坐标变换下, 总体系哈密顿量(1.2.17)式可以用相对坐标写出

$$H = \frac{(\frac{m_a}{M} \mathbf{P} - \mathbf{p})^2}{2m_a} + \frac{(\frac{m_A}{M} \mathbf{P} + \mathbf{p})^2}{2m_A} + V(r) = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + V(r) = H_R + H_r \quad (1.2.22)$$

其中, 相对运动质量为 μ , 称为约化质量

$$\mu = \frac{m_a m_A}{M} = \frac{m_a m_A}{m_a + m_A} \quad (1.2.23)$$

由此看出,对于电子围绕原子核运动时,由于 $m_e \ll m_A$, 因此 $\mu \approx m_e$, 在全同粒子情况下有 $\mu = m_e/2$ 。因此总体系哈密顿量 H 可以分两个部分:质心运动哈密顿量 H_R 和相对运动哈密顿量 H_r 。它们分别为

$$H_R = \frac{P^2}{2M} = -\frac{\hbar^2}{M} \nabla_R^2 \quad (1.2.24)$$

$$H_r = \frac{1}{2\mu} p^2 + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \quad (1.2.25)$$

可将波函数对质心运动和相对运动作变量分离:

$$\psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \Phi(\mathbf{R}) \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.2.26)$$

这时 Schrödinger 方程(1.2.16)可分解为

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \Phi(\mathbf{R}) = E_{CM} \Phi(\mathbf{R}) \quad (1.2.27)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V(r) \right] \Psi(\mathbf{r}) = E_r \Psi(\mathbf{r}) \quad (1.2.28)$$

质心运动是一个自由粒子的运动,用平面波来描述。而相对运动可看作是一个具有约化质量为 μ 的粒子在 $V(r)$ 场中运动,因此把二体问题约化为一体问题,理论上只需要在质心坐标中来求解单体运动方程。这时 E_r 值称为体系的能量本征值, $\Psi(r)$ 称为本征函数,上述的定态 Schrödinger 方程又称能量本征值方程。

定态 Schrödinger 方程的解分为两大类:对于束缚态,即 $E_r < 0$, 它的本征值解为分立的;而对于散射态,即 $E_r > 0$, 它的本征值解为连续的。为了简化标记,后面将 E_r 记为 E 。

用径向 Schrödinger 方程求解库仑势之束缚态能级的 Bohr 公式,成功地解释了实验测量总结出的氢原子电子辐射频率 ν 的巴耳末 (Balmer) 公式,这是量子力学中一个成功的实例。(详见附录 2 和附录 5)

5. 连续性方程

由 Schrödinger 方程得到连续性方程

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\mathbf{r}, t) + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0 \quad (1.2.29)$$

其中概率密度和概率流密度分别定义为

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2$$

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^*(\mathbf{r}, t) \nabla \psi(\mathbf{r}, t) - \psi(\mathbf{r}, t) \nabla \psi^*(\mathbf{r}, t)] \quad (1.2.30)$$

连续性方程表示概率守恒。(推导过程见:周世勋编《量子力学教程》^[3])

6. 泡利 (Pauli) 不相容原理

自旋为 $1/2$ 的费米子 (Fermion) 满足不相容原理 (Pauli exclusion principle)。全同粒子是指质量、自旋、同位旋全相同的微观粒子。对于两个全同的自旋为半整数的粒子,不可能占据同一个微观态,这个微观态在量子力学中用相空间中的相格来描述。相空间是指位形空间和动量空间的六维空间,每个相格的体积为 $(2\pi\hbar)^3$ 。

泡利不相容原理的确立,解释了原子稳定的原因。而用经典力学的观点,高能量态的电子,要自发向低能量电子态跃迁,由于泡利不相容原理,当低能量态已经被其他电子占据

时,这个跃迁是被禁戒的,因此原子的状态是稳定的。只有原子被激发,低能态的电子被电离时,才可能出现高激发态的电子向这个被电离的电子空穴态进行跃迁,并伴随释放 X 射线,这就是测量原子的辐射光谱的实验原理。泡利不相容原理要求两个费米子系统的波函数必须是反对称的,即

$$\psi_{n_1 n_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -\psi_{n_1 n_2}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \quad (1.2.31)$$

反对称表示中,当两个电子处于同一个态时,波函数为 0,自然表示两个费米子不能处在同一个微观态。在处理费米子系统的波函数时,包括多费米子体系,必须要考虑反对称化效应,称为波函数的反对称化。

7. 量子力学效应

(1) 不确定原理,又称为测不准原理(Uncertainty principle)。经常遇到的不确定关系是

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar, \quad \Delta E \Delta t \geq \hbar, \quad \Delta J \geq \hbar \quad (1.2.32)$$

当两个力学量算符之间不可对易时,在实验上不可能同时准确测量这两个力学量,满足不确定关系。不确定关系式(1.2.32)表明,微观世界的粒子位置与动量不能同时准确确定,连带着角动量也不能准确确定,因而对微观世界粒子运动无轨道而言,上面第二个不确定关系表明,当微观世界的粒子的能量确定后,它处于这个状态的寿命就不能准确确定了。例如:在能级纲图中,如果这个能级不稳定,表明这个能级的能量有一个不确定范围,称为能级宽度,这就是能级的寿命,因而从这个能级发射的粒子的能量就不确定,在实验中测量出的粒子发射谱就有明显展宽效应。能级寿命越短,能谱展宽效应越强。

(2) 量子力学的隧道效应。当能量低于位垒($E < V_0$)时,与经典力学不同的是,量子力学可以计算出仍有概率透过,即位垒穿透,如图 1.2 所示。

对于质量数大于镭的元素,从质量表上可以看出,发射 α 粒子对应的反应 Q 值是正的,表明是放热反应。但是由于库仑位垒的存在,阻止了 α 粒子发射,由量子力学的隧道效应, α 粒子可以通过位垒穿透,形成 α 衰变,位垒越高,穿透概率越小。例如铀核的 α 衰变半衰期可以达到 10^{19} 年。这种隧道效应无法用经典力学来解释,因此,隧道效应是量子力学的独有特征。

(3) 束缚态能级是分立的。实验观测到原子的线状能谱,电子从高分立能级向低分立能级的 γ 跃迁产生的能量是确定的,光谱的能量就是两个电子分立能级的能量差。又知在三维谐振子势中,量子力学得到本征能量是

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{3}{2}\right), n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.2.33)$$

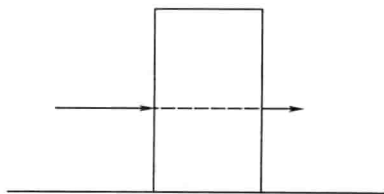


图 1.2 隧道效应示意图

基态($n=0$)的能量为 $E_0 = \frac{3}{2}\hbar\omega$,称为零点能。量子力学中零点能不为零是量子力学的特征之一。另外,由于谐振子本征态的能量是确定的($\Delta E = 0$),由不确定原理得到 $\Delta t \rightarrow \infty$,能

级寿命无穷大,分立能级都是稳定的。零点能不为零也被光在晶体散射的实验测量所证实,当将晶体系统冷却到温度趋于绝对零度时,光在晶体散射的实验测量表明,晶体中的原子仍然有零点振动,这也验证了量子力学对微观世界描述的正确性。

1.3 量子力学与经典力学的关系

量子特性可归结为普朗克常数 $\hbar = h/2\pi = 1.054\,5 \times 10^{-27}$ 尔格·秒,在研究黑体辐射时,普朗克发现黑体发射和吸收电磁波的能量是不连续的,以 $\hbar\omega$ 为能量单位,而不是像经典理论能量为连续的。当 $\hbar \rightarrow 0$ 时量子效应可忽略,量子力学回到经典力学,这一点类似于相对论中当 $c \rightarrow \infty$ 时回到牛顿力学。

1. 对应原理 Correspondence principle (Bohr 1923)

当 $\hbar \rightarrow 0$ 时量子力学对应经典力学。

(1) 量子效应的一个特征是某些力学量的本征值是量子化的,如谐振子能量,当 $\hbar \rightarrow 0$ 时,得到经典的力学量中的能量变化是连续的。

(2) 不确定性原理 (Uncertainty principle), $\Delta p \Delta x \geq \hbar$, 当 $\hbar \rightarrow 0$ 时,粒子坐标与动量可同时确定,经典轨道运动的概念也就完全适用了。

2. 力学量期望值随时间的变化

量子力学中观察的力学量是算符在态矢量 $|\psi\rangle$ 下的期望值,力学量期望值随时间变化满足

$$\begin{aligned} \frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} &= \int \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{A} \psi d\mathbf{r} + \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi d\mathbf{r} + \int \psi^* \hat{A} \frac{\partial \psi}{\partial t} d\mathbf{r} \\ &= \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{H} \hat{A} \psi d\mathbf{r} + \int \psi^* \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \psi d\mathbf{r} - \frac{i}{\hbar} \int \psi^* \hat{A} \hat{H} \psi d\mathbf{r} \\ &= \int \psi^* \left(-\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] + \frac{\partial \hat{A}}{\partial t} \right) \psi d\mathbf{r} \end{aligned}$$

一般力学量算符 $\hat{A}$ 不显含时间 t , $\frac{\partial \hat{A}}{\partial t} = 0$, 则有

$$\frac{d\langle \hat{A} \rangle}{dt} = -\frac{i}{\hbar} \int \psi^* [\hat{A}, \hat{H}] \psi d\mathbf{r} = \langle -\frac{i}{\hbar} [\hat{A}, \hat{H}] \rangle \quad (1.3.1)$$

若 $\hat{A}$ 与 $\hat{H}$ 可对易, $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$, 算符 $\hat{A}$ 的期望值不随时间变化。在量子力学中,与 $\hat{H}$ 可对易的量是一个运动守恒量。

当力学量是描述粒子的坐标和动量时,由正则方程得到(为简化表示,下面的算符都省略算符上的符号)

$$\frac{d\langle \mathbf{q} \rangle}{dt} = \langle -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{q}, H] \rangle = \langle \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \rangle \quad (1.3.2)$$

$$\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt} = \langle -\frac{i}{\hbar} [\mathbf{p}, H] \rangle = \langle -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \rangle \quad (1.3.3)$$

它的形式与经典力学的正则方程很相似,但它的意义是不同的。经典力学中 $\frac{d\mathbf{q}}{dt}$ 是描述质点

的坐标如何随时间变化,而量子力学中的 $\frac{d\langle \mathbf{q} \rangle}{dt}$, $\frac{d\langle \mathbf{p} \rangle}{dt}$ 分别是描述坐标和动量的期望值随时间的变化。

3. 泊松括号与运动方程

经典力学中正则方程为

$$\frac{dq_i}{dt} = \{q_i, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_i}; \quad \frac{dp_i}{dt} = \{p_i, H\} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (1.3.4)$$

其中泊松括号定义为

$$\{A, B\} \equiv \sum_i \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial B}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial B}{\partial q_i} \right) \quad (1.3.5)$$

可以证明当 $\hbar \rightarrow 0$ 时,量子力学的对易关系趋于经典的泊松括号

$$[A, B]/i\hbar \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \{A, B\} \quad (1.3.6)$$

因而正则方程(1.3.2)和(1.3.3)退化为经典力学的正则方程(1.3.4)。首先证明下面的对易关系成立

$$[p_i, f(\mathbf{q})] = -i\hbar \frac{\partial f(\mathbf{q})}{\partial q_i} \quad (1.3.7)$$

事实上,将上面的对易关系作用到波函数上

$$[p_i, f(\mathbf{q})]\psi = p_i(f(\mathbf{q})\psi) - f(\mathbf{q})p_i\psi$$

利用复合函数求导

$$[p_i, f(\mathbf{q})]\psi = (p_i f(\mathbf{q}))\psi + f(\mathbf{q})p_i\psi - f(\mathbf{q})p_i\psi = (p_i f(\mathbf{q}))\psi = -i\hbar \frac{\partial f(\mathbf{q})}{\partial q_i}\psi$$

由于对任意波函数 ψ 都成立,因此两边去掉 ψ , (1.3.7)式得到证明。特别是当 $f(x) = x$ 时,得到的结果就是 Heisenberg 对易关系式

$$[x, p_x] = i\hbar \quad \text{一般表示为} \quad [q_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij} \quad (1.3.8)$$

利用多个力学量算符乘积的对易关系分解为两两对易的恒等式

$$[AB, C] = A[B, C] + [A, C]B \quad (1.3.9)$$

为了简化表示,不失一般性,用 p 和 q 来表示动量和坐标的 i 分量,得到以下的约化

$$\begin{aligned} [p^2, f(q)] &= p[p, f] + [p, f]p = -i\hbar(pf' + f'p) = -i\hbar([p, f'] + 2f'p) \\ &= -i\hbar(2f'p - i\hbar f'') = -2i\hbar(f'p) + O(\hbar^2) \end{aligned}$$

其中, $O(\hbar^2)$ 是 $\hbar^2$ 以上的小量,且有 $O(\hbar^2)/i\hbar \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} 0$,以及

$$\begin{aligned} [p^3, f(q)] &= p[p^2, f] + [p, f]p^2 = -2i\hbar(pf'p) + O(\hbar^2) - i\hbar f'p^2 \\ &= -2i\hbar(f'p - i\hbar f'')p - i\hbar f'p^2 + O(\hbar^2) = -3i\hbar f'p^2 + O(\hbar^2) \end{aligned}$$

由此递推得到普遍表达式

$$[p^n, f(q)] = -i\hbar \frac{\partial f(q)}{\partial q} p^{n-1} + O(\hbar^2) \quad (1.3.10)$$

假定 $A = q^m \equiv f(q)$, $B = p^n$,因此利用(1.3.9)式得到

$$[q^m, p^n] = inm\hbar q^{m-1} p^{n-1} + O(\hbar^2) \quad (1.3.11)$$

这时泊松括号为 $\{A, B\} = nmq^{m-1}p^{n-1}$,因此验证了(1.3.6)式。

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} [A, B]/i\hbar = \lim_{\hbar \rightarrow 0} [q^m, p^n]/i\hbar = nmq^{m-1}p^{n-1} = \{q^m, p^n\} = \{A, B\} \quad (1.3.12)$$