

量子力学导学

精要 拓展 演练

STUDY GUIDE FOR
QUANTUM MECHANICS

阎元红 编著

清华大学出版社

阎元红 编著

量子力学导学

精要 拓展 演练

STUDY GUIDE FOR
QUANTUM MECHANICS



清华大学出版社

北京

内 容 简 介

本书由知识精要、专题拓展、基本练习和问题思考四部分构成。知识精要部分共12节,全面概括了量子力学的核心概念、原理;专题拓展设有21个,每个专题既有必要的理论铺垫,更有大量的例题详解;在基本练习部分中,精选了205道基本练习题,它们基本涵盖了本科量子力学的教学内容;在问题思考部分中,选编了315道思考题。书中对基本练习题和思考题提供了必要的答案或提示。

本书可作为学生学习量子力学或准备研究生入学考试的学习材料,也可作为某些高校开设有关量子力学考研讲座的教材,同时也可以作为讲授量子力学的教师的教学参考书。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

量子力学导学:精要·拓展·演练/阎元红编著.--北京:清华大学出版社,2014

ISBN 978-7-302-36697-3

I. ①量… II. ①阎… III. ①量子力学—高等学校—教学参考资料 IV. ①O413.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2014)第117186号

责任编辑:朱红莲 赵从棉

封面设计:常雪影

责任校对:刘玉霞

责任印制:王静怡

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦A座 邮 编:100084

社总机:010-62770175 邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质 量 反 馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 装 者:北京鑫海金澳胶印有限公司

经 销:全国新华书店

开 本:185mm×260mm

印 张:18.5

字 数:446千字

版 次:2014年9月第1版

印 次:2014年9月第1次印刷

印 数:1~2500

定 价:39.00元

产品编号:052320-01

量子力学是物理学专业本科学生必修的一门重要的基础理论课,也是绝大多数高校和科研院所物理学专业研究生入学考试的一门必考课程.对学生而言,学好这门课程无论是对知识的加深、技能的训练、认识的提高和能力的培养,还是为后续研究生课程学习和将来的科研工作做准备,均具有十分重要的意义.

本书是作者在长期从事本科生量子力学和量子力学(Ⅱ)教学实践积累的基础上形成的,希望能对量子力学的教学和学生考研有所帮助.

本书由四部分构成.第1章:知识精要,共12节;第2章:专题拓展,由21个专题构成,为配合和巩固相关内容,本章中对一百多道例题进行了详解,同时,还编辑了几十道题供学习者及时训练;第3章:基本练习,由6部分组成,共计205道基本练习题;第4章:问题思考,共有315道题,内容涵盖了旧量子论的创立、新力学的诞生、量子力学各章节的知识点、正统派与保守派之争、量子力学后续发展、量子力学对化学发展的影响、量子力学与生命科学、由量子理论引发出的技术如量子隐形传态、量子通信、量子信息技术、量子力学开拓者的贡献、量子力学建立与发展带给我们的启示,等等.需进一步说明的是,本书对绝大部分的习题与思考题均给出了提示或答案以方便读者学习.

本书有以下主要特色.

1. 在知识精要上

一是一改过去传统上将量子力学的内容以章节为对象组织提炼的做法,而是以贯穿量子力学内容的核心概念与主要问题为中心,归纳、概括、整合成纵向贯通、横向联系的12个相对独立而又开放的知识单元精要系统.

二是增加了国内量子力学教材或学习指导书中未曾有的量子力学概念与应用逻辑关联结构图,以使学生在整体上把握量子力学各部分知识之间的联系、整体的结构和相关的应用,从而避免了学生学习过程中广泛存在的“只见树木,不见森林”的弊端.

2. 在专题拓展上

一是选择中等以上难度但又会在研究生考试中涉及的问题作为专题内容,如突变问题、非标谐振子问题的处理、量子态的坍缩问题、S-G实验与态的测量·概率/数

目比问题、角动量问题、不确定度关系问题、简并问题、全同粒子体系的问题、电磁场中运动的粒子,此外,还增加了量子力学中的作图训练、绘景与绘景变换等.虽然看上去有些专题的题目貌似熟悉,但我们却在其内容的深度与广度方面精心选材、编撰,拓展了学生知识学习的深度和考研的应变能力.

二是在每一专题的例题详解中,注重分析、注重过程、注重连贯.在传统的教材或学习指导书中,例题解答时往往是站在编写者的高度或从教者的视角,用他们的思维方式“开门见山”直接求解,对具体的过程和关键的步骤过于“压缩”,从而导致学习者只能看到求解的表观步骤,却无法知晓编者是如何分析,以便找到解决问题的切入点,更由于某些过程的过度“压缩”而导致了学生学习中的困难.因此,传统做法中“开门见山”式的直接求解,导致一些学生只能是模仿与记忆性的学习,分析和解决问题的能力不能很好地培养.本书作者则试图站在学习者的立场上,尤其是力求站在学生的角度,借用学生的眼光或思维方式去分析、讨论和解答.在例题的解答中注重分析,注重“解压缩”,力求引导学生从物理概念、原理的角度去分析和找到解答问题的切入点,通过详尽的解答,既体现了解题过程中思维的连续性,让学生学起来感到连续与流畅、渐进与自然,又在无形中培养了学生的思维能力和分析与解决问题的能力.

3. 在问题选择上

一是创新了习题类型.除了传统的计算与证明题外,我们还增加了“图形题”和“释图题”.一般来说,人们学习量子力学时,往往不太关注图形类的问题,而与图形有关的问题在各类教材中也未曾看到,因此,本书作者在多年教学中总结了部分图形问题,让学习者描述出相应的示意图,如束缚态、势垒贯穿、势阱、势能曲线、谐振子、能级、波函数、概率、黑体辐射、康普顿效应,等等,以使学生加深对图形题的认识和对相关物理本质的了解;“释图题”是本书作者对问题类型的一种创新,到目前为止,我们尚未在其他文献中看到,这种类型题的主导思想是通过呈现在读者面前的若干幅图片/图形,如物理学家的珍贵图片或与量子力学相关的示意图形,让学生来做出合乎科学史实的联想,并用自己的语言逻辑地表述出来.这种“图形题”和“释图题”属于开放性的问题,它将问题置于量子力学发展的大背景下,将学生的注意力从长期侧重的具体定量计算与推理,有意识地向定性分析与思考上引导,有助于学生发散性思维的培养和训练以及物理学素养的形成与发展.

二是我们精心选择了 205 道习题和 315 道思考题.习题是按照学习量子力学时的内容顺序和易难程度顺序编排,练习题大多属于中等难度之下,通过这些题的训练,有助于学生用活量子力学的基本概念和原理、夯实量子力学的基础.315 道思考题中分为“是什么”的题目与“为什么”的题目两种,“是什么”的题目主要是让学生熟练记忆基本事实与基本知识,它们虽然大多是量子力学的具体知识点,但却是学生学习的重要基础;“为什么”的题目主要是让学生不仅要知道是什么,更要明确为什么,既要知其然也要知其所以然.因此,这种题侧重于理解概念与原理.“是什么”的题目与“为什么”的题目构成了学生向较高学习目标迈进前的必备基础或知识“本底”.此外,315 道思考题是对前述 205 道习题的极好补充,它们不仅有益于学生发现和掌握按常规习题无法检测到的基本概念和一些细节问题,而且有利于学生在硕士研究生入学考试和复试时的专业面试,因为这些题目中,有很多曾经是一些研究生招生单位的面试试题.

4. 在学科素养上

作为学科的教学而非知识的教学,是作者秉承的教学理念.因此,我们将本书作为一个开放的系统去构建,无论是第1章的“知识精要”,还是第4章的“问题思考”,本书都恰当地体现出了学科源流和从历史走向未来的开放性理念,注重渗透量子力学发展史及其应用.具体体现在两点:第一,注重史实呈现与“相关的问题”或给出的问题“提示”有机结合.通过重要事实或理论创建的时间节点,纲要性地呈现了量子力学的发展.同时,我们还对量子理论的开拓者作了及时的同步介绍,使人与事相关联,体现了科学的人文精神;第二,注重应用介绍.在思考题的问题或提示中,本书简单介绍了基于量子力学而发展起来的物理学学科内与学科外的新兴交叉学科,体现了量子力学在现代科技中的应用.这将极大地增进学生对量子力学作为“现代科学的理论支柱”的全面认识,拓展对量子力学的认知范畴,避免过于功利化的学习,促进学生科学素养的形成.这样做的目的是希望本书不仅给予学生学习量子力学基本内容方面的具体指导,而且在学生科学素养的形成中起到促进作用.

本书可作为学生学习量子力学课程的参考书,也可以作为高校量子力学考研课程(36~48课时)的教材以及准备以量子力学为考研课程的考研学生的学习用书.此外,本书还可以作为教授量子力学课程的教师的教学参考书.本书对绝大多数的习题与思考题均给出了提示或答案.

本书在出版过程中,得到了清华大学出版社编辑朱红莲和赵从棉女士的鼎力支持,得到了中国地质大学(北京)赵长春博士的无私帮助,在此,作者由衷地表示深深的感谢!

本书书名题字是由我国著名书法家欧阳中石先生的弟子、首都师范大学教授赵宏博士不吝赐写,在此,作者对赵宏教授由衷地表示深深的谢意!

鉴于作者水平有限,错误和不当之处在所难免,敬请读者批评指正!

阎元红

2014年6月

第 1 章 知识精要	1
1.1 基本概念	1
1.2 基本原理	6
1.3 波函数	8
1.4 算符	12
1.5 力学量测量	16
1.6 表象变换	18
1.7 近似方法	21
1.8 量子跃迁	23
1.9 Dirac 符号	24
1.10 量子散射	26
1.11 实验	27
1.12 概念结构图	32
第 2 章 专题拓展	38
2.1 节点、F-H、维里定理及其应用	38
2.2 贝克-豪斯多夫公式	50
2.3 Glauber 公式	53
2.4 一些特殊算符的运算问题	55
2.5 束缚态条件下能级满足的条件	56
2.6 对 δ 函数问题的进一步讨论	67
2.7 薛定谔方程的逆问题及其解	71
2.8 中心力场中的粒子	75
2.9 球方势阱问题及其解	77
2.10 突变问题	84
2.11 在圆弧上运动的粒子问题	86

2.12	非标谐振子问题的处理	89
2.13	量子力学中的测量和量子态的坍缩	92
2.14	S-G 实验与态的测量·概率(数目)比	95
2.15	角动量、表象、测量等综合问题	101
2.16	量子力学中的图形问题	115
2.17	不确定度关系问题的处理	124
2.18	简并度及定态微扰下简并问题的处理	136
2.19	自旋与多粒子体系的问题	165
2.20	电磁场中运动的粒子	190
2.21	量子力学中的绘景	207
第 3 章	基本练习	221
3.1	波函数 薛定谔方程	221
3.2	力学量与算符	226
3.3	氢原子 中心力场	231
3.4	表象理论	232
3.5	微扰理论与变分法	236
3.6	自旋与全同粒子	241
第 4 章	问题思考	246
附录 A	常用物理学常量表	279
附录 B	常用数学公式	280
参考文献		284
后记		285

不积跬步,无以至千里;不积小流,无以成江海.

——荀子

知识精要

第

1

章

1.1 基本概念

1. 黑体辐射

相关知识 能量量子化假设,能量子: $\epsilon_0 = h\nu = \hbar\omega$, $\epsilon = n\epsilon_0$; 普朗克黑体辐射公式:

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} d\nu. \text{ 黑体是个理想化模型,在相同温度下黑体的辐射规律是相同的.}$$

说明 ①1900年德国物理学家 M. 普朗克提出能量量子化假设,不仅圆满地解释了黑体辐射问题,还解释了固体的比热容问题等;②从普朗克黑体辐射公式可以导出维恩公式、瑞利-金斯公式和斯特藩-玻耳兹曼定律;③黑体辐射实验是量子力学的实验基础之一;④M. 普朗克“因他的对量子的发现而推动物理学的发展”荣获1918年诺贝尔物理学奖;⑤M. 普朗克是历史上被冠名为理论物理学教授第一人.

2. 光电效应

相关知识 光量子假设;光子: $\epsilon = h\nu = \hbar\omega$, $p = \hbar k$; 光电效应方程: $h\nu = \frac{1}{2}m_e v^2 + A$; 光的波粒二象性.

说明 ①光量子假设推广了普朗克的能量子假设;②光电效应是量子力学(书中将量子力学简记为 Q. M.) 的实验基础之一;③光电效应是由1888年首先证实了电磁波存在的德国物理学家海因里希·鲁道夫·赫兹(Heinrich Rudolf Hertz)于1887年发现,爱因斯坦1905年发表论文解释了光电效应,并于1921年获诺贝尔物理学奖;④1916年,美国实验物理学家罗伯特·安德鲁·密立根通过光谱实验结果,完全证实了爱因斯坦光电效应方程的正确性.

3. 康普顿效应

相关知识 $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_{ec}(1 - \cos\theta)$; 康普顿效应证实了光量子理论的正确性,它是量子力学的实验基础之一.

4. 物质波

相关知识 实物粒子具有波动性,且 $\lambda = \frac{h}{p}$, $\nu = \frac{E}{h}$ 或 $E = \hbar\omega$, $P = \hbar k$.

说明 ①1923年,法国物理学家德布罗意提出了实物粒子波动性的物质波假说,实物粒子具有波粒二象性;②1927年,D-G 电子衍射实验证实了实物粒子的波动性;③1929年,德布罗意因发现了电子的波动性,以及他对量子理论的研究而荣获诺贝尔物理学奖.

5. 波粒二象性

相关知识 涉及实物、非实物粒子的波粒二象性;波粒二象性的实验现象和理论描述;波粒二象性与不确定原理的关系.

说明 波粒二象性是微观粒子的普遍特征,是量子力学的基本特征之一.

6. 势垒贯穿/隧道效应

相关知识 透射系数与反射系数 $R = \frac{J_{\text{反}}}{J_{\text{入}}}$, $D = \frac{J_{\text{透}}}{J_{\text{入}}}$; $R + D = 1$.

说明 ①基本的实例有 α 粒子衰变、金属中电子的冷发射、热核聚变、超导 Josephson 结、隧道二极管;②隧道效应成为电子扫描隧道显微镜的基础;③1956年,日本物理学家江崎玲於奈发现隧道二极管;1960年,美籍物理学家加埃沃发现了超导体中的隧道贯穿,随后,英国物理学家约瑟夫森从理论上预言了 Josephson 隧道效应现象;1983年,德国科学家宾尼和瑞士科学家罗雷尔研制出了第一代扫描隧道显微镜,使人们可以通过扫描隧道显微镜和原子力显微镜观察原子表面结构、操控原子.

7. 量子化

相关知识 在经典物理学中,对物理量变化的最小值没有限制,它们可以任意连续变化.但在量子力学中,物理量只能以确定的大小一份一份地进行变化,具体有多大要随体系所处的状态而定.我们把这种物理量只能取某些分离数值的特征称做量子化,变化的最小份额称为量子.例如,频率为 ν 的谐振子,其能量不是连续变化,而是只能以 $h\nu$ 的整数倍变化,欲使其能量改变 $h\nu$ 的几分之几是不可能的.微粒的角动量也是量子化的,其固有量子是 $\hbar$. 量子化是微观体系基本的运动规律之一,它与经典力学是不相容的.

说明 玻尔-索末菲量子化条件 $\oint p_q dq = nh$ ($n = 1, 2, 3, \dots$) 可用来求解能谱.

8. 量子效应

相关知识 在体系中凡是 h 或 $\hbar$ 起作用的现象称为量子效应.

说明 ①量子效应有微观和宏观两种;②隧道效应、能量或角动量量子化、原子光谱、...都是微观量子效应;③磁通量子化、超导体中的 Josephson 隧穿、液氦中的超流动性、激子玻色-爱因斯坦凝聚、量子霍尔效应等都是宏观量子效应.

9. 电子自旋

相关知识 电子自旋是电子的内禀属性,没有经典的图像对应;有自旋角动量、自旋磁矩、自旋算符、泡利矩阵.

说明 ①1925年,荷兰的乌伦贝克和古德施密特提出了电子自旋假设;②自旋的实验基础有S-G实验、反常塞曼效应、光谱精细结构、爱因斯坦-德·哈斯效应;③电子的自旋可由英国理论物理学家、量子力学的奠基者之一的保罗·狄拉克1928年建立的狄拉克方程直接推出。保罗·狄拉克也因为“发现了原子理论的新形式(即狄拉克方程)”,与埃尔温·薛定谔共同获得1933年诺贝尔物理学奖。

10. 全同粒子 全同粒子体系

相关知识 全同粒子按自旋可分为两类,即费米子与玻色子;全同粒子体系是多粒子体系;全同粒子体系遵从全同性原理;泡利不相容原理是全同性原理的推论;判断复合粒子是费米子还是玻色子的方法是:由总自旋而定,奇数个费米子组成的复合粒子仍为费米子,由偶数个费米子或玻色子组成的粒子均为玻色子。

说明 ①在全同粒子体系中,全同粒子不可区分性的思想最初是由印度物理学家S. N. 玻色(Satyendra Nath Bose, 1894—1974)提出来的;②全同粒子体系中,玻色子体系遵从玻色-爱因斯坦统计律;费米子体系遵从费米-狄拉克统计律。

11. 概率流密度矢量

相关知识 $J = \frac{i\hbar}{2\mu}(\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi)$; 定态下,概率流密度矢量不随时间变化。

12. 守恒量

相关知识 守恒量的条件: $\frac{\partial \hat{F}}{\partial t} = 0, [\hat{F}, \hat{H}] = 0$ 。

说明 ①守恒量一定指力学量,其算符一定是厄米算符;②量子力学中的守恒量与经典力学中的守恒量不同;当算符 $\hat{A}$ 不显含时间且 $[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ 时, A 不一定是守恒量;③要会判断守恒量。

13. 塞曼效应

相关知识 正常、反常两种,也称为简单和复杂塞曼效应;反常:3条以上,正常:3条及其以下。

说明 ①1896年,荷兰物理学家塞曼发现把产生光谱的光源置于足够强的磁场中,磁场作用于发光体使光谱发生变化,一条谱线即会分裂成几条偏振化的谱线,这种现象称为塞曼效应,它被认为是19世纪末20世纪初物理学最重要的发现之一。1902年,塞曼与洛伦兹因这一发现共同获得了诺贝尔物理学奖;②塞曼效应证实了原子具有磁矩和空间取向量子化;③利用塞曼效应可以测量电子的荷质比,在天体物理中,塞曼效应可以用来测量天体的磁场。

14. 光谱的精细结构

相关知识 源自电子自旋与轨道的耦合作用,产生附加能量从而导致谱线分裂!例如 $3P \rightarrow 3S$ 的Na黄光;精细结构常数 $\alpha \approx 1/137$ 。

15. 表象

相关知识 表象是态与力学量的表达方式；选择表象就是在状态空间选择一套正交归一的基矢量；要掌握表象变换公式和表象变换的特点；变换矩阵。

说明 ①量子力学中有多种表象，如坐标表象、动量表象、能量表象、角动量表象、粒子数表象、狄拉克无表象表示，等等。②英国物理学家狄拉克和德国物理学家约当发展出了表象变换理论，证明了各种量子论表象的等价性。

16. 能量表象

相关知识 以势阱中能量算符本征态为基矢量的表象、以谐振子能量算符本征态为基矢量的表象、以氢原子能量算符本征态为基矢量的表象都是常用表象。

说明 能量表象不唯一，故在谈论能量表象时，一定要具体化，不能笼统说。

17. 粒子数表象

相关知识 粒子数表象也称福克表象，完备的本征矢为 $|n\rangle$ ；产生算符、湮灭算符。

说明 熟练掌握产生算符、湮灭算符作用在 $|n\rangle$ 上的两个重要公式。

18. 角动量表象

相关知识 角动量表象是以角动量算符共同本征态为基矢的表象。

说明 角动量表象与能量表象一样不唯一，要具体问题具体选择。

19. 表象变换

相关知识 当已知波函数和算符在某一基矢下的表示时，求它们在给定的另一基矢下的表示。变换矩阵： $S=[S_{\alpha\beta}]$, $S_{\alpha\beta}=(\psi_\alpha, \varphi_\beta)$ ； $\psi_\alpha \rightarrow A$ 表象的本征态， $\varphi_\beta \rightarrow B$ 表象的本征态。

20. 对称性

相关知识 全同粒子的交换对称性。 $\hat{H}$ 交换对称； ψ 具有对称性。

21. 宇称

相关知识 正(偶)宇称态，负(奇)宇称态；具有确定宇称的条件。

说明 ①要会判断体系具有什么样的宇称性；②求解出的波函数要考虑其宇称性要求；③1957年，华裔物理学家杨振宁、李政道因发现在弱相互作用下宇称不守恒而荣获诺贝尔物理学奖。

22. 简并与简并度

相关知识 具体的例子：①一、二、三维线性谐振子能量的简并度；②H 原子能级的简并度；③ L^2 的简并度；④全同粒子体系交换简并，等等。

说明 ①简并是针对本征值而言的；②简并与对称性有关系；③在微扰中有简并问题，见本书后面的专题讨论和例题详解。

23. 力学量的完全集

相关知识 设有一组彼此独立而又相互对易的力学量($F_1, F_2, \dots$), 它们的共同本征函数系为($\varphi_{n_1}, \varphi_{n_2}, \dots$), 如果给定一组量子数($n_1, n_2, \dots$)就可以确定体系的一个可能态, 那么, 就称($F_1, F_2, \dots$)为体系的一个力学量完全集。

说明 ①力学量完全集的特征: 力学量完全集的共同本征函数系构成一个希尔伯特空间; 力学量完全集所包含力学量的数目等于量子数组($n_1, n_2, \dots$)所包含的量子数数目, 即体系的自由度数; 力学量完全集中, 所有力学量是可以同时测量的。②力学量的完全集有多种多样, 如(x, y, z)、($\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$)、($\hat{H}, \hat{L}^2, \hat{L}_z, \hat{S}^2, \hat{S}_z$)、 $\dots$ 。

24. 量子态

概念: 在量子力学中, 微观粒子的运动状态称为量子态。

说明 量子态需要由一组量子数来表征, 这组量子数的数目等于粒子的自由度数。

25. 定态

相关知识 能量具有确定值的状态; 定态波函数的表示式。

说明 ①会用三种方法判断体系是否为定态; ②要知道哪些态是常见的定态; ③给定一个态后, 会判断出是否为定态。

26. 束缚态与非束缚态

相关知识 束缚态是指粒子被外力(势场)约束于特定空间区域内, 粒子在无穷远区域内波函数等于零的态; 非束缚态是指粒子不受外力(势场)约束, 在无穷远区域内波函数不等于零。

说明 ①束缚态是一个非常重要的态, 很多问题中常常出现; ②束缚态下, 粒子能量是离散的, 如势阱中的粒子、线性谐振子、氢原子等; ③非束缚态下, 能量连续分布, 如自由粒子。

27. 态函数

相关知识 态函数是描述微观粒子状态的数学函数表达式, 由态函数可获得粒子的全部信息; 它具有单值、连续、有限的性质, 波函数平方可积; 波函数是概率幅, 具有统计意义; 态函数可分为本征态、非本征态。

说明 ①态函数、波函数和态矢量都是一样的, 只不过是在不同视角下的称谓而已; ②1926年6月, 德国物理学家玻恩发表了题为《散射过程的量子力学》一文, 提出了波函数的统计诠释, 1954年玻恩荣获诺贝尔物理学奖。

28. 概率幅

相关知识 概率幅即波函数、态函数、态矢量; 用 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 表示, 是非实在波。

说明 概率幅描述、量子化现象、波粒二象性是量子力学的三大基本特征。

29. 跃迁及其概率幅、黄金规则

相关知识 跃迁概率幅公式、跃迁概率公式、黄金规则表达式。

作为理论物理学结构基础的普遍定律,应当对任何自然现象都有效.

—— A. 爱因斯坦

1.2 基本原理

一般来说,人们将量子力学中的基本原理归纳了 5 个,在此,我们也称 5 个基本原理或假设.在这部分里,我们不但总结 5 个基本原理,还将量子力学中的其他原理、定律一并总结如下.

1. 量子力学的 5 个基本原理/假设

(1) 波函数假设

微观粒子的状态用波函数完全描述;波函数具有单值、连续、有限性.

(2) 薛定谔方程(以后简记为 S. E.)假设

微观体系的波函数满足薛定谔方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q; t) = \hat{H}(q) \psi(q; t)$.

(3) 力学量算符假设

力学量用线性厄米算符表示.

说明 力学量用线性厄米算符表示,但是,一个线性厄米算符不一定就对应一个力学量.

(4) 态 ψ 中的测量假设,态叠加原理

对一个力学量 F 进行测量,若在本征态 ψ_n 中测量,得对应的本征值 λ_n ;若在非本征态 ψ 中测量,则得一系列的可能值,且一系列的可能值属于本征值谱中的值,即可能值 $\in \{\lambda_n, \lambda\}$. 可能值 λ_n 的概率为 $|C_n|^2$.

说明 ① $\hat{F}\psi_n = \lambda_n\psi_n$; ② $\sum_n |C_n|^2 = 1$.

态叠加原理:如果 ψ_1 和 ψ_2 都是薛定谔方程的解,那么, ψ_1 和 ψ_2 的线性叠加 $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$ 也是薛定谔方程的解,式中 c_1, c_2 是复数.

说明 ①态叠加原理的物理意义是:如果 ψ_1 和 ψ_2 描述粒子的两个可能状态,则它们的线性叠加 ψ 也是描述系统的一个可能状态. ②与态叠加原理相关的最为著名的例子就是电子双缝干涉. 电子的双缝干涉实验是将电子通过双缝,观察通过双缝后所记录下来的干涉条纹. 特别是,当电子的发射速率如此之小以至于每次只能有一个电子穿过双缝后,干涉条纹仍然存在. 这样,干涉条纹的存在就不能解释为电子之间相互影响所造成的,而必须理解为电子用特殊的方式同时穿过了两条缝并与自身发生干涉. ③从数学表述来看,态叠加原理是薛定谔方程的解所具有的性质. 由于薛定谔方程是个线性方程,任意几个解的线性组合(叠加)也是薛定谔方程的解.

(5) 全同性原理

交换全同粒子体系中任意一对粒子的全部坐标(包括空间坐标和自旋坐标),体系的状态不变.

说明 ①全同性原理有多种表述,如在全同粒子体系中,粒子具有不可区分性;全同

粒子所组成的体系中,二全同粒子互相代换不引起体系物理状态的改变,等等;②交换对称性:全同粒子体系的波函数在交换任意两个粒子的全部坐标时必须是对称或者是反对称的;③可由全同性原理推出泡利不相容原理;④有研究表明:共价键来源于全同性原理。

2. 海森堡不确定度原理

数学表达式: $\Delta F \Delta G \geq \frac{\hbar}{2}$, $[\hat{F}, \hat{G}] = i\hbar$.

式中: $\Delta F = \sqrt{\Delta F^2} = \sqrt{(F - \bar{F})^2} = \sqrt{(F^2 - \bar{F}^2)}$;

$\Delta G = \sqrt{\Delta G^2} = \sqrt{(G - \bar{G})^2} = \sqrt{(G^2 - \bar{G}^2)}$.

说明 ①海森堡不确定原理亦称为“海森堡不确定度关系”,它是量子力学的一个基本原理,由德国物理学家海森堡于1927年提出。②该原理表明:一个微观粒子的某些物理量(如位置和动量,或方位角与动量矩,还有时间和能量等),不可能同时具有确定的数值,其中一个量越确定,另一个量的不确定程度就越大。测量一对共轭量的误差的乘积必然大于常数 $\hbar/2\pi$,它反映了微观粒子运动的基本规律,是物理学中又一条重要原理。③“这种不确定性正是量子力学中出现统计关系的根本原因”(海森伯语)。④海森堡不确定原理成为哥本哈根学派对量子力学解释的两大支柱之一,当然,也成为争论的核心之一。

3. 维恩位移定律

数学表达式: $\lambda_m T = b$, 其中 λ_m 为辐射的峰值波长,维恩位移常数 $b = 2.897685(51) \times 10^{-3} \text{ mK}$ 。

说明 ①维恩位移定律是描述黑体电磁辐射(见图1.1)能流密度的峰值波长与自身温度之间反比关系的定律;②1893年,德国物理学家威廉·维恩(Wilhelm Wien)通过对实验数据的经验总结提出本定律。

4. 斯特藩定律

单位体积内的辐射总能量: $E = \sigma T^4$, 其中

$$\sigma = 5.67 \times 10^{-12} \text{ W}/(\text{cm}^2 \cdot \text{K}^4)$$

为斯特藩-玻耳兹曼常量。

说明 斯特藩定律又称斯特藩-玻耳兹曼定律,是热力学中的一个著名定律,由斯洛文尼亚物理学家约瑟夫·斯特藩和奥地利物理学家路德维希·玻耳兹曼分别于1879年和1884年各自独立提出。提出过程中斯特藩通过对实验数据的归纳总结,玻耳兹曼则是从热力学理论出发,通过假设用光(电磁波辐射)代替气体作为热机的工作介质,最终推导出与斯特藩的归纳结果相同的结论。

5. 埃伦费斯特定律

数学表达式: $m \frac{d^2}{dt^2} \langle r \rangle = \langle F(r) \rangle$ 。

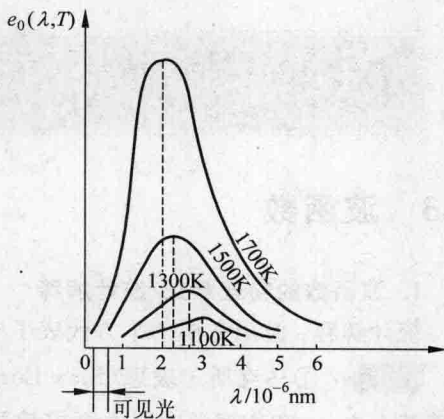


图 1.1 绝对黑体单色辐射强度按波长的分布曲线

说明 埃伦费斯特定理是因物理学家保罗·埃伦费斯特命名. 在量子力学的海森堡绘景里, 取海森堡方程的期望值, 就可以得到埃伦费斯特定理.

6. 泡利不相容原理

在费米子组成的系统中, 不能有两个或两个以上的粒子处于完全相同的状态.

说明 ①1924年, 沃尔夫冈·泡利发表了他的“不相容原理”: 原子中不能有两个及其以上的电子处于同一量子态上, 上述表述是后来的推广. 泡利不相容原理又称泡利原理、不相容原理, 是微观粒子运动的基本规律之一. ②泡利不相容原理是全同性原理的一个推论. ③在原子中完全确定一个电子的状态需要4个量子数, 所以泡利不相容原理在原子中就表现为: 不能有两个或两个以上的电子具有完全相同的4个量子数. ④泡利不相容原理成为电子在核外排布形成周期性从而解释元素周期表的准则之一, 也是费米-狄拉克统计律的基础. ⑤1945年, 泡利因他在1925年即25岁时发现的“不相容原理”, 获诺贝尔物理学奖.

量子力学的主要特征并不是不可对易代数, 而是概率幅的存在.

——P. 狄拉克

1.3 波函数

1. 波函数的物理意义/统计解释

统计解释: 波函数模的平方代表了空间找到粒子的概率密度.

说明 ①马克斯·玻恩(Max Born, 1882—1970), 德国犹太裔理论物理学家, 量子力学奠基人之一, 在物理学中的主要成就是创立矩阵力学和对波函数作出统计解释; ②1926年6月, 玻恩在他发表题为《散射过程的量子力学》的论文中, 提出了波函数的统计诠释——波函数的二次方代表粒子出现的概率, 并以此对薛定谔的波动力学作了重要的补充; ③玻恩因对量子力学的基础性研究尤其是对波函数的统计学诠释, 获得1954年的诺贝尔物理学奖.

应用: 通过对如下若干表示的正确理解, 可考察对波函数物理意义或统计解释的掌握情况.

$$(1) |\psi(\mathbf{r}, t)|^2, |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau;$$

$$(2) |\psi(\mathbf{p}, t)|^2, |\psi(\mathbf{p}, t)|^2 d\mathbf{p};$$

$$(3) \text{波函数归一化(归格化)的两种结果: } ①\delta_{nm}; ②\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')/\delta(\mathbf{p}'-\mathbf{p}).$$

2. 波函数的性质

相关知识 单值、连续、有限, 也称其为自然条件或标准条件.

说明 ①在讨论具体问题, 波函数的“单值、连续、有限”常常要用到; ②注意掌握 δ 势的跃变条件: $U(x) = \pm\gamma\delta(x), \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = \pm\frac{2\mu\gamma}{\hbar^2}\psi(0).$

3. 波函数的两个不确定性

①常数因子；②常数相位因子。

4. 具有特殊性质的波函数/态矢量

(1) 本征态

① 定义： $\hat{F}\psi_n = \lambda_n\psi_n$, $\hat{F}|n\rangle = \lambda_n|n\rangle$ 或 $\hat{F}|\psi_n\rangle = \lambda_n|\psi_n\rangle$;

② 正交、归一性： $\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$;

③ 完备性： $\psi(r,t) = \sum_n C_n\psi_n(r,t)$, $\sum_n |C_n|^2 = 1$;

④ 封闭性： $\int |q\rangle\langle q| dq = 1$, $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$.

(2) 定态波函数

① 表达式： $\psi(q,t) = \psi(q)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, $\psi(r,t) = \psi(r)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$;

② 条件： $\frac{\partial \hat{H}}{\partial t} = 0$;

③ 特点： $\frac{\partial |\psi|^2}{\partial t} = 0$.

(3) 束缚态与非束缚态

① 束缚态： $U(r) \neq 0$, $\psi(r)|_{r \rightarrow \infty} = 0$, $E < U(r) < 0$;

② 非束缚态： $U(r) = 0$, $\psi(r)|_{r \rightarrow \infty} \neq 0$, $0 < U(r) \neq 0$, 例如：平面波、球面波、势垒穿透中的态函数；

③ 特点：束缚态， E_n 本征值是不连续的、离散谱/量子化的；非束缚态， E 本征值是连续的。

(4) 简并态与非简并态

① 简并 $\lambda_n \Longleftrightarrow \psi_{ni} (i=1,2,3,\dots,f)$;

② 非简并 $\lambda_n \Longleftrightarrow \psi_n$.

(5) 正(偶)宇称态、负(奇)宇称态

① 条件： $U(-r) = U(r)$, (a) $\hat{P}\psi(\hat{r}) = \psi(-\hat{r}) = \psi(\hat{r})$, 正(偶)宇称态；

(b) $\hat{P}\psi(\hat{r}) = \psi(-\hat{r}) = -\psi(\hat{r})$, 负(奇)宇称态；

② 实例：势阱分为对称、非对称两种，对称时具有确定的宇称；一维线性谐振子的宇称由 $(-1)^n$ 决定；H 原子 $\psi_{nlm_l m_s}$ 的宇称由 $(-1)^l$ 决定。

5. 要熟记常用的几种具体波函数

(1) 各种势阱对应的波函数

① 阱宽为 $0 \sim a$ 的非对称势阱

$$\psi_n(x,t) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, & 0 \leq x \leq a \\ 0, & -\infty < x < 0, a < x < +\infty \end{cases}$$

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2\mu a^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$