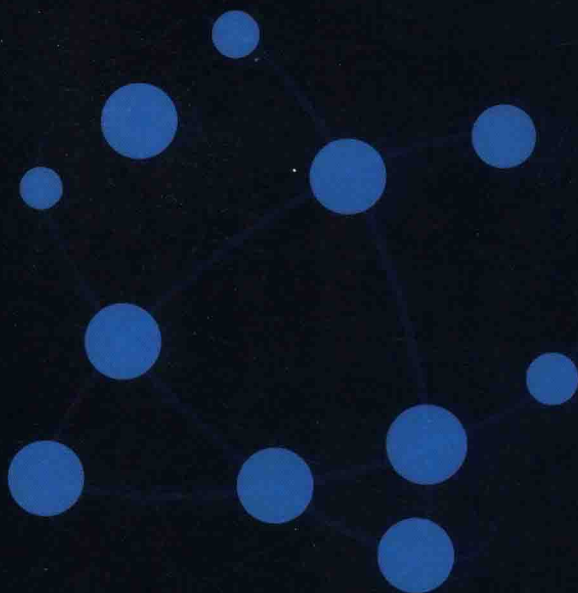


量子力学

文钦若 孙宝玺 编著



科学出版社

量子力学

文钦若 孙宝玺 编著



科学出版社

北京

内 容 简 介

本书的章节和内容基本上与周世勋编著的《量子力学教程》(第一版)一致,所以便于初学者学习与参考。本书增加了“相对论波动方程”一章,并且对势场中的狄拉克方程作了较小的修改,其目的是扩展势场中的狄拉克方程的适用范围。

“绪论”的前三节内容似乎与量子力学无关,其实是受量子力学中的波粒二象性、Aharonov-Bohm 效应以及辩证法思想等的影响而引导出来的。这三节的内容也是本书中一些新思想的基础,而这些新思想的引入,主要是为了消除量子力学中的奇异现象;这些新思想对各种表示式的理解有一些改变,但并不影响量子力学的数学体系。

本书可作为高等学校物理类专业量子力学课程的教材或参考书,也可供相关科技人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学/文钦若,孙宝玺编著. —北京:科学出版社,2017.8

ISBN 978-7-03-054186-4

I. ①量… II. ①文… ②孙… III. ①量子力学 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 200299 号

责任编辑:窦京涛/责任校对:彭珍珍 杜子昂

责任印制:张 伟/封面设计:无极书装

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>

北京京华虎彩印刷有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2017 年 8 月第 一 版 开本:720×1000 1/16

2018 年 1 月第二次印刷 印张:28

字数:560 000

定价:69.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

自序

本书中前七章的章节安排与内容基本上与周世勋编著的《量子力学教程》一致，所以便于初学者学习与参考。第八章为“相对论波动方程”，考虑到相对论量子力学也应包含在量子力学的基础理论之中，所以增加了这一章。

第一章绪论的前三节内容似乎与量子力学无关，其实这三节内容是受量子力学中的波粒二象性、Aharonov-Bohm 效应以及辩证法思想的影响而引导出来的，也是本书中一些新思想的基础，而这些新思想的引入主要是为了消除量子力学中的奇异现象。这些新思想对量子力学中的数学体系影响很小，只是对各种表示式的理解有一些改变而已。

由于作者水平与知识有限，在引入新思想的过程中一定存在许多不妥之处，希望读者批评指正。

下面对本书中引入的一些新思想作一介绍：

(1) 物理学中的对立统一体。

对立统一规律是辩证法的根本规律，为了在物理学中引入辩证法，首先应弄清楚在物理学中存在哪些重要的对立统一体。

①孤立体系的总能量 E 守恒与存在转换的各分能量 E_i 不守恒应构成对立统一体。 E 与各 E_i 的关系式为

$$E = \sum_i E_i$$

各 E_i 之间的转换体现了对立性，而 E 守恒便体现了同一性。如果希望得到各 E_i 之间的转换规律，则还需根据具体情况以及物理定律作进一步的讨论。

当考虑自由粒子时，如果将粒子的动能视为单一形式的能量，则这样的体系中便不存在能量的转换；不过，由于粒子具有波粒二象性，而波中一定存在两种形式的能量转换（例如光子中应存在电场能与磁场能之间的转换），所以可以认为自由粒子体系仍可构成总能量守恒与分能量不守恒的对立统一体，但到底是什么能量之间的转换尚需探讨。

②粒子能流与能量子能流构成的对立统一体。（1.1-10）式为

$$Ev = (cp)c = (-cp)(-c)$$

其中 $E\nu$ 为粒子的能流，而 $(cp)c$ 与 $(-cp)(-c)$ 分别为正能量子与负能量子的能流。粒子能流与能量子能流的不同性体现了对立性，而这两种能流相等则体现了同一性。

在上式中，若令 $E = h\nu$ ，则在量子力学中通常将 ν 称为概率波的频率；因粒子是以速度 v 运动的，所以概率波的波长应为 $\lambda' = v/\nu$ 。如果令 $cp = h\nu'$ （或 $(-cp) = (-h)\nu'$ ），注意到在德布罗意关系式中， $p = h/\lambda$ ，则得 $\nu' = c/\lambda$ ，可将 ν' 与 λ 称为非概率波的频率与波长。

在 1.7 节中对德布罗意关系式作了重新理解，而这种重新理解便是在上述两种能流应构成对立统一体的启发下提出的，当然，这种理解的主要目的是说明量子力学中的波包是可以不扩散的。在对德布罗意关系式的重新理解中，还包含有一种思想，即认为戴维孙和革末测量到的波长应为真实波的波长而不是概率波的波长。利用 (1.8-6) 式可将非概率波变换为概率波。根据 (1.1-10) 式，还在 1.8 节“3”中对量子力学中自由粒子的运动进行了讨论。

③电磁场的有能部分与无能部分构成的对立统一体。在量子力学中对 Aharonov-Bohm 效应（以及 Aharonov-Casher 效应）解释的启发下，在 1.2 节中引入了下述观点：以磁感应强度 $\mathbf{B}$ 与电场强度 $\mathbf{E}$ 描写的场是电磁场中的有能部分， $\mathbf{B}$ 场与 $\mathbf{E}$ 场携带能量且可以屏蔽；以矢势 $\mathbf{A}$ 与标势 ϕ 描写的场是电磁场的无能部分， $\mathbf{A}$ 场与 ϕ 场不携带能量且不可屏蔽。有能场与无能场的不同性质体现了对立性；而 (1.2-2) 式以及 (1.2-5) 式与 (1.2-7) 式合在一起则体现了同一性，此同一性表示：如果已知矢势 $\mathbf{A}$ 与标势 ϕ ，则可以求出确定的磁感应强度 $\mathbf{B}$ 与电场强度 $\mathbf{E}$ ，如果已知磁感应强度 $\mathbf{B}$ 与电场强度 $\mathbf{E}$ ，可以求出确定的矢势 $\mathbf{A}$ 与标势 ϕ 。在 1.2 节“5”中还提出了电磁势中的规范项并不是任意函数以及势能零点也不是总能任意取值的观点。在 1.1 节“6”中讨论了引力场不携带能量的问题，进而在 1.3 节中提出了物质是由一个有能部分与一个无能部分构成的假设，且认为物质的无能部分是超距作用与无时间通信的媒体。这种假设是否可取尚需探讨。如果可取，则必然引出许多值得探讨的问题。例如，物质的无能部分有几种？物质的无能部分对现有物理学知识有哪些影响？当坐标系变换时，怎样保持超距作用中的同时性？怎样利用物质的无能部分传输比特信号等？

在 1.1 节“4”中，为了说明库仑作用力不是超距作用力，讨论了电荷不携带能量的问题。但应注意，电荷并不是物质的无能部分，而应将电荷视为描写无旋电场强度而引入的一个参量。

④波函数的概率解释与非概率解释构成的对立统一体。通常对波函数都采用概率解释，在 1.8 节“3”中提出了对波函数还应有非概率解释。概率解释主要适用于点粒子，而非概率解释主要适用于波包。根据这两种解释在 1.8 节“4”中讨论了物理量的携带者是点粒子还是波包的问题。这两种不同的解释体现了对立性；

对于不涉及真实测量的数学推导,这两种解释都能得到相同的关系统,从而体现了同一性。

还可以列举一些对立统一体,从略。

(2) 在 1.8 节“5”中讨论了在量子力学中引入负质量粒子的必要性。但迄今为止并未发现单独存在的负质量粒子,所以在量子力学中既要引入负质量粒子,又不能让负质量粒子被观测到。

在 1.8 节“1”中提出了在单粒子体系波包覆盖下的真空中存在正负粒子对的设想,其中的正粒子就是正质量粒子,将正质量粒子的静止质量 m 、普朗克常量 h 、电荷 q 变为 $-m$ 、 $-h$ 、 $-q$ 后,便可得到负粒子(即负质量粒子)。引入正负粒子对后,单粒子体系便可等效为一个全同正质量粒子数比全同负质量粒子数多一个的多粒子体系。对这样的多粒子体系还引入了下述假设:

①粒子间没有相互作用。根据这个多粒子体系的波动方程,用分离变量法可以得到单粒子体系的波动方程。

②可以说明正负粒子对中的两个粒子位于空间同一点而不可分离。为了使体系中各正质量粒子处在完全等同的地位,假设正负粒子对中的正质量粒子可以被单独的正质量粒子置换(或称为变换)。

③体系中只有单独的那个正质量粒子能被观测到。

④在波函数 $\psi(\mathbf{r}, t)$ 中,在 t 时刻在 $\mathbf{r}$ 处的正负粒子对密度与 $\psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$ 成正比,这可为波函数的概率解释提供依据。

(3) 在 1.3 节“5”中通过对电磁场的同体对偶变换讨论了电磁对称性。自由电磁场的同体对偶变换可用(1.3-6)式表示,而(1.3-6)式又可表示为复数 $(\mathbf{E} + ic\mathbf{B})$ 在复平面上作 $\pm\pi/2$ 角的旋转, $\mathbf{E}$ 与 $c\mathbf{B}$ 可称为同体对偶量。显然,当复数在复平面上旋转时,其实部与虚部都是变化的,所以不能将电荷与磁荷视为同体对偶量,电荷应为不变量,所以应认为电荷只能与表示对偶量的复数的模有关。当表示对偶量的复数在复平面上旋转任意 θ 角时,如果麦克斯韦方程组保持不变,则说明电磁体系一定是同体对偶体系,也说明电与磁是对称的。设 ρ 与 $\mathbf{j}$ 分别为电荷密度与电流密度,则电磁体系的同体对偶量应由(1.3-7)式与(1.3-9)式给出,进而可以说明电磁体系是电与磁对称的同体对偶体系。其中没有引入磁单极子,可以认为磁单极子并不存在。应注意,狄拉克磁单极子实际上是根据异体对偶变换提出的,如果认为存在狄拉克磁单极子,则磁荷 (q_b/c) 应该就是电荷 (q_e) 。

在量子力学中,如果将波函数 ψ 在复平面上旋转任意 θ 角,则波动方程应保持不变,所以可以将满足波动方程的体系视为同体对偶体系,这也可视为德布罗意平面波写为复数形式的原因。

(4) 在量子力学中通常只讨论概率密度 ω 与概率流密度 $\mathbf{J}$, 而不讨论能量密度 ρ_R 与能流密度 $\mathbf{j}_R$ 。在 2.4 节“2”中根据薛定谔方程导出了 ρ_R 与 $\mathbf{j}_R$ 所满足的

(2.4-13) 式。考虑到 ρ_R 与 j_R 这两个物理量的携带者很可能是波包而不是点粒子, 所以其中不含概率概念。当然, 如果不考虑真实测量, 则引入概率概念也未尝不可。在 8.2 节“4”中根据经修改后的含势能的狄拉克方程也导出了 ρ_R 与 j_R 所满足的 (8.2-19) 式。由于含势能的克莱因-戈登方程通常得不到合理的解, 所以在 8.3 节“3”中只导出了自由粒子的能量密度与能流密度所满足的连续性方程。在 8.3 节“4”中还讨论了自由克莱因-戈登粒子的概率密度与概率流密度, 但这种讨论不同于通常见到的讨论。

(5) 在 2.9 节中讨论了描写正负粒子的两种形式。在第一种形式中, 正粒子 (正质量粒子) 的能量算符 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 对应本征值 $E = \hbar\omega$ 的本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega t)$, 负粒子 (负质量粒子) 的能量算符 $i(-\hbar) \frac{\partial}{\partial t}$ 对应本征值 $-E = (-\hbar)\omega$ 的本征函数也为 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega t)$, 由于 ω 只能取正值, 所以 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega t)$ 不是傅里叶变换中的完备基组。在第二种形式中, 正粒子的能量算符 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ 对应本征值 $\hbar\omega$ 的本征函数为 $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega t)$, 负粒子的能量算符 $(i)^*(-\hbar) \frac{\partial}{\partial t}$ 对应本征值 $(-\hbar)\omega$ 的本征函数为 $\left(\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-i\omega t)\right)^*$, 正负粒子的这两个本征函数合在一起可以构成傅里叶变换中的完备基组。在量子力学中, 通常对正负粒子的描写实际是采用了第二种形式, 只是没有明确指出而已。

在第二种形式中, 对于薛定谔方程, 正粒子波函数与负粒子波函数之间的变换算符 $\hat{Q}$ 为共轭运算算符; 对于狄拉克方程, 则正粒子波函数与负粒子波函数之间的变换算符应为 (8.6-59) 式中的 $\hat{S}$ 。

还需要说明的一点是: 在 2.9 节中, 多处提到力学量算符, 为了叙述简单, 总是将能量算符当成力学量算符一起讨论。但在以后的 3.2 节“5”中又说到应将含时算符排斥在力学量算符之外, 其缘由可参看 3.2 节“5”。

(6) 在 2.15 节“3”中提出了自由粒子波包应为有限大的假设。如果自由粒子波包为有限大, 则当粒子被势场散射时, 粒子便有一个明显进入势场与离开势场的过程。如果希望利用 (3.2-1) 式严格证明 $\hat{p}_x$ 等算符是厄米算符以及证明

$$\langle \psi | [\hat{x}, \hat{p}_x] | \phi \rangle = i\hbar \langle \psi | \phi \rangle$$

中的 $\hat{p}_x$ 也是厄米算符, 则同样要求自由粒子的波包为有限大。自由粒子的波包应为有限大也是一种普遍的观点。在 2.15 节“3”的假设中并没有具有说服力的依

据,但可能比直接假设自由粒子的波包应为有限大稍微好一点。

(7) 在 3.3 节“3, 4, 5”中对测不准关系进行了一些讨论,这种讨论并不是什么新思想,其中较为重要的一点是将测不准关系分为两种,即含大于号的测不准关系与不含大于号的测不准关系。含大于号的测不准关系是根据不对易的两个力学量算符的对易关系式与在 ψ 态中的均方根差得到的,例如 $\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$, 其中 Δx 与 Δp_x 都是均方根差,可以在同一表象中求出。不含大于号的测不准关系是根据不对易的两个力学量算符对应的表象之间波函数的(广义)傅里叶变换得到的,例如 $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar$, 其中 Δx 表示在 x 表象中的波包宽度(指 $\psi^* \psi$ 的宽度),而不是均方根差;同理, Δp_x 表示同一波函数在 p_x 表象中的波包宽度。

(8) 在 4.5 节“4”以及在 4.6 节“1, 2”中讨论含时微扰时没有将体系的本征能量 E_m 以及微扰源中的角频率 ω_0 视为变量,而只将微扰源提供的连续能谱中的能量 E 视为变量。在 4.6 节“3, 4”以及在 4.7 节“2”中也采用了同样的观点,这与通常见到的观点有所不同,但所得到的最后结果是相同的。

还应注意的一点是:如果一方面取 $(t-t_0) \rightarrow \infty$, 另一方面又将 $(t-t_0)$ 作为有限值处理,则有所不妥。所以在 (4.6-9) 式以及在 (4.6-18) 式的推导过程中取 $(t-t_0) \rightarrow \infty$ 时都不能理解为 $(t-t_0)$ 真正趋向于无穷大,而是指 $(t-t_0)$ 足够大而已。 $(t-t_0)$ 的取值上限应受到跃迁概率 $\bar{W}_{k \rightarrow m} \leq 1$ 的限制,通常当 $\bar{W}_{k \rightarrow m}$ 足够大但尚小于 1 时, $(t-t_0)$ 已可以视为足够大。在 (4.6-19) 式中含有因子 $(t-t_0)$, 显然,当 $(t-t_0)$ 真正趋向于无穷大时,跃迁概率 $\bar{W}_{k \rightarrow m} \rightarrow \infty$, 这使得在讨论能级跃迁时通常只考虑平均跃迁速度。

(9) 在 5.4 节“2”中讨论鞍力场中角量子数为 l 时,束缚态能级数目 n_l 为有限值的条件,这也不是新思想,只是在通常的量子力学书中没有见到过而已。

(10) 在 6.1 节“2”中讨论了磁矩 $\mathbf{M}$ 与外磁感应强度 $\mathbf{B}$ 之间的相互作用能。这种讨论是由于 (6.1-2) 式与 (6.1-9) 式不一致以及 (6.1-3) 式与 (6.1-10) 式不一致引起的。而讨论的主要依据是:当哈密顿算符不含时间 t 时,体系的能量应守恒(见 3.4 节“3”)。这种讨论也不是新思想,但对初学量子力学的学生而言应该有所帮助。

(11) 在 6.6 节中讨论了经典带电粒子在电磁场中运动时的三个问题,分述如下:

①最小电磁作用原理。

最小电磁作用原理是指:如果一个带电粒子体系在没有电磁场时的哈密顿量 H 、拉格朗日量 L 等是已知的,则这个体系在加入电磁场后的哈密顿量 H 与拉格朗日量 L 等就可以用一种简单的方法得到,这种方法称为最小电磁作用原理。至于“最小”则是指作用量的极小值。由分析力学可知,存在两种作用量。1744 年,莫培督发现了第一种作用量,对于具有 N 个粒子的保守体系,他引入的作用量为

$$f = \int_A^B \sum_{n=1}^N \mathbf{p}_n \cdot d\mathbf{r}_n \quad (1)$$

以等能量变分符号 Δ (或称为全变分符号) 作用于上式可证: 真实运动的作用量取极值 (通常为极小值), 使 $\Delta f = 0$ 。1843 年, 哈密顿发现了第二种作用量, 对于保守体系, 他引入的作用函数为

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt \quad (2)$$

以等时变分符号 δ (δ 与 $\frac{d}{dt}$ 对易) 作用于上式可证: 真实运动的作用函数取极值, 使 $\delta S = 0$ 。

在上面的叙述中没有引入新思想。下面谈一种书中没有提到的新思想。势场 U 中粒子的能量动量关系式为

$$(E - U)^2 = c^2 \mathbf{p}^2 + (mc^2)^2 \quad (3)$$

对于正质量粒子, 因为 $E \geq U$, 则得

$$E = \sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + (mc^2)^2} + U \quad (4)$$

在上式中, 若以哈密顿量 H 代替 E , 并将 H 写为动能、势能以及 mc^2 三项之和, 则得

$$H = \left(\sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + (mc^2)^2} - mc^2 \right) + mc^2 + U \quad (5)$$

其中 $\left(\sqrt{c^2 \mathbf{p}^2 + (mc^2)^2} - mc^2 \right)$ 称为动能项。如果在动能项中可消去 mc^2 , 则在量子力学中由 $\hat{H}\psi = E\psi$ 可以推知: (6.6-6) 式 (或 (6.6-4) 式) 与 (6.6-3) 式是等效的。对于薛定谔方程, 在动能项中可消去 mc^2 的条件是: $c^2 \mathbf{p}^2 \ll (mc^2)^2$, 这时动能项可化为 $\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$ 。对于狄拉克方程, 则在动能项中可消去 mc^2 的条件是: β 矩阵的本征值应为 1 (对于负质量粒子, 则 β 矩阵的本征值应为 -1)。当考虑狄拉克方程的非相对论近似时, 实际上也与 β 矩阵的本征值应为 1 的思想一致。这种思想也是在 8.1 节 “3” 中对势场中的狄拉克方程进行修改的原因之一。

②在经典物理学中由类氢原子引出的自旋轨道耦合项。

(6.6-15) 式为所得到的结果。

③点电荷之间库仑作用力的修改。

经修改后的两个点电荷的相互作用势能由(6.6-27)式给出,而经修改后的点电荷电场强度的表示式由(6.6-30)式给出。(6.6-27)式中的势场 $U(r)$ 破坏了库仑势场的强对称性,所以使氢原子中的简并能级分裂。

(12) 在 7.1 节“2”中说到,全同性原理可表述为:当两个或多个全同粒子的波包存在重叠时,交换其中的全同粒子不引起物理状态的改变。其中强调了全同粒子的波包重叠对全同性原理的重要性。在 7.3 节“4”中的讨论主要是想说明:想利用全同性原理来实现两个电子的远距离自旋纠缠态(指 $|0,0\rangle$ 态与 $|1,0\rangle$ 态)是不可能的;但是,如果想实现远距离自旋平行态或自旋反平行态则是可能的。由于对两个电子波包的分离过程尚有待进一步探讨,所以这个问题并没有得出肯定的结论。

(13) 在 8.1 节“3”中对势场中的狄拉克方程进行了修改,(8.1-23)式为通常见到的方程,而(8.1-24)式为经修改后的方程。其修改理由随着内容进展共有四条,在 8.1 节“3”中说了第一条,其余三条分别在 8.5 节、8.6 节“4”、8.7 节“2”中说到。此外,还可参看 8.8 节“4”以及第 8 章的习题 9。其实,各种修改理由之间存在关联,其中只有第一条理由最重要。

(14) 在 8.1 节“2, 4”中引入了仿狄拉克方程,在 8.2 节“2”中说到仿狄拉克方程(8.1-25)应描写自旋为零的粒子。在仿狄拉克方程中含有动量的模对应的算符 $\hat{p}$ 。当粒子在二维或三维势场中运动时,对算符 $\hat{p}$ 的处理就变得很困难,这个问题尚有待探讨。

(15) 由于希望经修改后的势场中的狄拉克方程能适用于各种势场,从而可扩展势场中狄拉克方程的适用范围,所以在 8.9 节“1”中用经修改后的狄拉克方程讨论了在球谐振子势场中的能级;在 8.9 节“2”中还用仿狄拉克方程讨论了在线性谐振子势场中的能级。由于能力所限,其求解方法中可能存在不合理之处(主要指(8.9-6)式),但从求得的结果中尚未看出有明显不合理之处。

文钦若 孙宝玺

2017 年 5 月

物理常数表

普朗克常量	$h = 6.626176(36) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ $\hbar = 1.0545887(57) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$
真空中的光速	$c = 2.99792458(12) \times 10^8 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$
真空介电常量	$\varepsilon_0 = 8.85418782(7) \times 10^{-12} \text{ C}^2 \cdot \text{N}^{-1} \cdot \text{m}^{-2}$
真空磁导率	$\mu_0 = 12.5663706 \times 10^{-7} \text{ H} \cdot \text{m}^{-1}$
电子电荷	$e = 1.6021892(46) \times 10^{-19} \text{ C}$
电子质量	$m_e = 9.109534(47) \times 10^{-31} \text{ kg}$
电子经典半径	$r_0 = 2.81777(4) \times 10^{-15} \text{ m}$
质子质量	$m_p = 1836.15152(70)m_e$
精细结构常数	$\alpha = 1 / 137.03604(11)$
玻尔半径	$a_0 = 0.52917706(44) \times 10^{-10} \text{ m}$
玻尔兹曼常量	$k = 1.380662(44) \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$

目 录

物理常数表

第 1 章 绪论	1
1.1 牛顿力学、麦克斯韦电磁理论与爱因斯坦狭义相对论	1
1.2 电磁场中的无能矢势场与标势场	9
1.3 物质的构成	15
1.4 普朗克假设	22
1.5 原子结构的玻尔理论	26
1.6 光子的波粒二象性	28
1.7 静止质量不为零的粒子的波粒二象性	32
1.8 量子力学中的真空与单粒子体系	35
习题	44
第 2 章 薛定谔方程	45
2.1 狄拉克 δ 函数和平面波的归一化	45
2.2 薛定谔方程	51
2.3 算符概述	56
2.4 连续性方程	64
2.5 正交曲线坐标系与波函数的标准条件	68
2.6 定态问题	75
2.7 求解定态薛定谔方程的分离变量法	77
2.8 本征方程	84
2.9 量子力学中对正负粒子的描写	88
2.10 一维对称方势阱	91
2.11 势垒贯穿	98
2.12 线性谐振子	101
2.13 轨道角动量算符	106
2.14 类氢离子	112
2.15 球谐振子与一般势场	118
习题	126

第3章 力学量算符与表象变换	129
3.1 算符的对易关系	129
3.2 线性厄米算符与力学量算符	132
3.3 两个力学量同时有确定值的条件和测不准关系	143
3.4 力学量平均值随时间的变化和守恒定律	154
3.5 态的表象变换和态的矩阵表示	159
3.6 算符的表象变换和算符的矩阵表示	162
3.7 广义傅里叶展开与狄拉克符号	165
3.8 量子力学公式的矩阵表示	178
3.9 么正变换	182
3.10 薛定谔表象和海森伯表象	188
3.11 线性谐振子与占有数表象	193
习题	200
第4章 近似方法	203
4.1 非简并定态微扰论	203
4.2 简并能级的定态微扰论	210
4.3 变分法	216
4.4 求氢原子基态能量的变分近似法	221
4.5 含时微扰论	224
4.6 跃迁概率	230
4.7 原子对光的吸收与发射	238
4.8 选择定则	244
习题	246
第5章 散射	248
5.1 两体碰撞和散射截面	248
5.2 玻恩近似	252
5.3 粒子在势场中的弹性散射(分波法)	259
5.4 莱维森定理	267
5.5 球方势阱与球方势垒对粒子的散射	273
5.6 质心坐标系与实验室坐标系	279
习题	281
第6章 自旋与角动量	282
6.1 电子的自旋	282
6.2 角动量	285

6.3	自旋算符	289
6.4	自旋为 $1/2$ 的粒子的波函数	292
6.5	两个角动量的相加	295
6.6	经典带电粒子在电磁场中的运动	300
6.7	自旋为 $1/2$ 的带电粒子在电磁场中的泡利方程	307
6.8	简单塞曼效应	310
6.9	原子光谱的精细结构	312
	习题	316
第 7 章	全同粒子	319
7.1	全同粒子的特性	319
7.2	全同粒子的波函数和泡利不相容原理	322
7.3	两个电子的自旋波函数	327
7.4	两个全同粒子的弹性散射	333
7.5	氢原子	337
7.6	氢分子	343
	习题	348
第 8 章	相对论波动方程	350
8.1	狄拉克方程	350
8.2	狄拉克粒子的自旋、荷流矢量与速度算符	356
8.3	自由粒子的克莱因-戈登方程	364
8.4	自由粒子狄拉克方程的平面波解	370
8.5	克莱因佯谬	375
8.6	狄拉克方程的洛伦兹变换、正能解与负能解之间的变换	382
8.7	势场中狄拉克方程的非相对论近似	401
8.8	氢原子光谱的精细结构	410
8.9	球谐振子与线性谐振子	421
	习题	429

第1章 绪 论

1.1 牛顿力学、麦克斯韦电磁理论与爱因斯坦狭义相对论

1. 引言

通常将 17 世纪后期出现牛顿(Newton)力学开始至爱因斯坦(Einstein)提出狭义相对论之前的物理学称为经典物理学。在经典物理学中,各领域中物理学理论的发展都与牛顿力学有关。牛顿力学的基础是牛顿的三个定律、伽利略(Galileo)变换与牛顿万有引力定律。

19 世纪中期,麦克斯韦(Maxwell)总结了各种电磁现象,建立了麦克斯韦方程组,并预言了电磁波的存在。1888 年,赫兹(Hertz)用实验证实了电磁波的存在。电磁波包括的范围很广,无线电波、光波、X 射线、 γ 射线都是电磁波,只是波长不同而已。

如果将机械波与电磁波作比较便可发现两者有一个明显区别,即机械波的传播需要介质而电磁波可以在真空中传播。机械波传播时存在两种能量之间的互换,即介质中动能与势能之间的互换。机械波在介质中的传播速度是由介质的性质决定的。如果考虑机械波在某坐标系中的传播速度,则还应考虑介质在此坐标系中的移动速度。对于真空中的电磁波,也存在两种能量即电场能与磁场能之间的转换。由麦克斯韦方程组得到的电磁波,在真空中的传播速度总是光速 c (常量)而与坐标系的选取无关。在光的电磁理论发展过程中,有人曾提出过“以太”学说,即认为光是在介质“以太”中传播的,但“以太”学说在 1881 年被迈克耳孙-莫雷(Michelson-Morley)实验否定。爱因斯坦不认为存在“以太”,所以提出了光速不变原理,此原理是 1905 年爱因斯坦提出狭义相对论的基础。

2. 爱因斯坦质能关系式

在狭义相对论中,能量 E 与质量 M 之间的质能关系式为: $E = Mc^2$ 。

1) 质能等效原理

在狭义相对论建立后,爱因斯坦与一些科学家又论证了质能等效原理。质能

等效原理是指：对于每一种能量，质量是对能量的等效描写，而质量具有惯性是对能量具有惯性的等效描写，简言之，质量与能量是等效的。为了进一步说明质能等效原理的含意，下面举几个例子。

例 1 在桌上放一个苹果，在桌旁静止的观察者看来，苹果具有静止质量 m ；在桌旁跑过的观察者看来，苹果具有运动质量 M ， $M > m$ ，此例说明运动能与质量等效。

例 2 将一个苹果由寒冷的室外带入温暖的室内，苹果进入室内后将有热能渗入苹果，所以苹果的质量将增大。此例说明热能与质量等效。

例 3 将一个苹果切开为两半(设苹果的质量没有流失)，由于在切开苹果的过程中需要加入能量，如果有一部分能量流入苹果，则使得两个半拉苹果的质量之和大于苹果被切开前的质量。同理，一个被拉伸的弹簧质量将大于未拉伸时的质量。

例 4 设一个静止带电粒子的总电场能为 E_e ，则 $m_e = \frac{E_e}{c^2}$ 称为粒子的电磁质量， m_e 是带电粒子静止质量 m 的组成部分， $m = m_0 + m_e$ ， m_0 称为固有质量，是其他能量对应的静止质量。电子是带电粒子中静止质量最小的粒子，电子的静止质量有可能全部是电磁质量。

设能量变化量 ΔE 对应的质量变化量为 ΔM ，则 $\Delta M = \frac{\Delta E}{c^2}$ ，通常 ΔM 的值很小，难以准确测量，所以质能等效原理并未得到实验的定量验证，但物理学家都认为质能等效原理是正确的。

2) 自由粒子的能量-动量关系式

设自由粒子的速度为 v ，动量为 p ，静止质量为 m ，运动质量为 M ，则

$$\left\{ \begin{array}{l} M = \frac{m}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \\ E = Mc^2 \\ p = Mv, \quad p = Mv(\text{矢量的模}) \end{array} \right. \quad (1.1-1)$$

从(1.1-1)式中消去 v 与 M 得

$$E^2 = c^2 p^2 + m^2 c^4 \quad (1.1-2)$$

上式即为自由粒子的能量-动量关系式。由(1.1-1)式可知，当 m 取正值时， E 也应取正值；当 m 取负值时， E 也应取负值。反过来，对于自由粒子，当 E 取正值时， m 也应取正值；当 E 取负值时， m 也应取负值，这是在量子力学中必须注意

的问题。由(1.1-2)式可得

$$E = \pm mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \quad (1.1-3)$$

应注意, 上式只是数学运算的结果, 此结果说明: 同一个 m 可以对应正负两种能量值。而物理学中的要求是: 自由粒子能量的符号应与自由粒子静止质量的符号一致。为了使数学运算与物理要求一致, 可对上式作规定如下: 设 m 只取正值, 当 E 取正值时, 对应粒子的静止质量为 m ; 当 E 取负值时, 对应粒子的静止质量为 $-m$ (而不是 m 自身取负值)。对于静止质量取正值的粒子, 当 $p \ll mc$ 时, 将(1.1-3)式中的根式作泰勒(Taylor)级数展开且只取前两项得

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m} \quad (1.1-4)$$

其中, $\frac{p^2}{2m}$ 就是牛顿力学中的动能表示式, 但应注意, 在牛顿力学中, $p = mv$, 而在上式中, $p = mv$ 。如果作泰勒级数展开时多取一项, 则得

$$E = mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{8} \frac{p^4}{m^3 c^2} \quad (1.1-5)$$

上式中最后一项称为相对论修正项。(1.1-2)式可改写为

$$p_\mu p_\mu = -m^2 c^2 \quad (1.1-6)$$

其中, $\mu = 1, 2, 3, 4$ 。 p 在直角坐标系中的三个分量为 p_1, p_2, p_3 , 而 $p_4 = \frac{iE}{c}$,

$i = \sqrt{-1}$ 。 $p_\mu p_\mu$ 应对 μ 求和, 即 $p_\mu p_\mu = \sum_{\mu=1}^4 p_\mu p_\mu$, 这种省略求和号而对相同角标

求和的约定称为爱因斯坦约定, 在此书中将采用这种约定。在四维 Minkowski 空间 (常称为闵氏空间) 中, (1.1-6) 式右边的 $-m^2 c^2$ 应为标量 (即其值与坐标系的选取无关), 则左边的 $p_\mu p_\mu$ 也应为标量。 $p_\mu p_\mu$ 可视为两个四维矢量的标积 (其度规矩阵为单位矩阵)。 p_μ 的矩阵表示为

$$(p_\mu) = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ \frac{iE}{c} \end{pmatrix}, \quad \text{常记为 } (p_\mu) = \begin{pmatrix} \mathbf{p} \\ \frac{iE}{c} \end{pmatrix} \quad (1.1-7)$$