

东北师范大学文库

新编量子力学

王锡绂

XINBIAN LIANGZI LIXUE

东北师范大学出版社

东北师范大学文库

新编量子力学

王锡绂

东北师范大学出版社
长 春

图书在版编目(CIP)数据

新编量子力学/王锡绂. —长春:东北师范大学出版社, 2004. 4

ISBN 7 - 5602 - 2440 - 7

I. 新... I. 王... II. 量子力学 N. 0413. 1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2004)第 022127 号

☐责任编辑:王忠山 ☐责任校对:方 军

☐封面设计:李冰彬 ☐责任印制:张允豪

东北师范大学出版社出版发行
长春市人民大街 5268 号(130024)

电话:0431—5695744 5688470

传真:0431—5695734

网址: <http://www.nenup.com>

电子函件: sdcbbs@mail.jl.cn

东北师范大学出版社激光照排中心制版

吉林省吉新月历制版印刷有限公司印装

2004 年 4 月第 1 版 2004 年 4 月第 1 次印刷

幅面尺寸:140 mm×203 mm 印张:15.25 字数:300 千

印数:0 001—1 000 册

ISBN 7 - 5602 - 2440 - 7/O · 107 定价:30.00 元

本书系东北师范大学
图书出版基金项目

前 言

20 世纪 20 年代,作为物理学革命成果之一的量子力学产生于原子物理.在接着的半个多世纪中,量子力学为核物理、核技术、固体物理、粒子物理等多学科的建立和发展发挥了关键作用,取得了极大的成功.不仅在微观世界,包括凡是普朗克常量 h 起作用的现象,而且在宏观世界,甚至包括一些宏观过程,都服从量子力学规律.经典物理学实质上是量子物理学的一个近似.从这个意义上讲,可以说整个自然界是量子的世界.

近十几年来,由于学术界对量子力学基本概念的深入探讨、精巧实验的实现以及随之而来的诸多方面的应用,该领域有了许多重大的发现,如几何相位、纠缠态、量子测量、退相干和量子信息等.这些新的进展进一步巩固了量子力学的原理,推出了一些全新的概念.在与相关学科的相互渗透中,量子力学开辟了一个个崭新的研究方向*.

无数的实验、科研以及生产的检验证明,量子力学的理论体系和计算方法是正确的.

为了在较短的时间(如 70 课时左右)内将这门体系庞大、内容丰富的知识讲授给物理学科以及其他相关学科的大学生,就必须精选内容,其中包括必须掌握的基本概念、基本理论和基本计算方法等.既不替代后续的专业课,如核物理、固体物理、统计物理等,

* 例如参考文献【13】所介绍的.

又不重复原子物理(量子物理)已经学过的内容,如学科发展史、实验的细节以及多方面的应用等.同时,对目前仍处在探讨中的前沿课题所涉及的一些概念和理论工具也给予必要的阐述,如相干态,纯态与混合态,表象变换,二能级系统,突发微扰和浸渐微扰,贝里相位等.这些题目有的本身就是量子力学的基本理论,有的则是为了帮助读者深入理解量子力学的精髓和现代应用而提供的有力工具.

狄拉克记号与具体表象无关,在演算中它既能表示状态又可组成算符(如投影算符等),是文献中广为使用的工具.教材中较早引入并使用狄拉克记号,以培养学生尽早掌握这一有效工具.

为了使学生加深理解基本理论和提高计算能力,每章末都附有一定数量典型习题,若能独立习作,定会大有收益.书后还附有习题参考答案或提示(有的题目有几种解法,这里作为启发只提供其中之一),这在目前公开出版的同类教科书中是绝无仅有的.

本书执行实用国际单位制(SI).

本书是参照《物理系本科理论物理课程体系改革与课程内容现代化研究项目》(《面向 21 世纪教学内容和课程体系改革》项目中编号为 02-5-25)的精神编写的.起草大纲时,北京师范大学喀兴林教授和首都师范大学李申生教授提出了不少宝贵的建议,作者受益匪浅.在此谨表诚挚的谢意.

对于东北师范大学物理系对本书出版的积极支持,作者表示衷心的感谢.

由于作者学识有限,书中错误和不当之处在所难免,恳请教师同仁及广大学生不吝赐教.

王锡绂

2004 年 2 月于东北师范大学

目 录

第一章 量子力学的基本原理	1
§ 1.1 态函数 量子力学中物理量的平均值	1
§ 1.2 主要物理量算符 算符的本征值方程	8
§ 1.3 不确定关系 物理量完备组	18
§ 1.4 薛定谔方程 连续性方程	24
§ 1.5 物理量变化速度的算符 运动积分 定态薛定谔方程 状态宇称	28
§ 1.6 用格林函数求解非定态薛定谔方程*	32
习 题	36
第二章 定态方程的简单应用	40
§ 2.1 一维定态运动的基本特性	40
§ 2.2 有限深方势阱	44
§ 2.3 谐振子	52
§ 2.4 自由粒子(平面波、波包)	59
§ 2.5 势垒的反射和透射	67
习 题	74
第三章 表象理论	77
§ 3.1 坐标表象及动量表象 各种表象的等价性	77

* 号部分可不讲授,仅供学生参考。

§ 3.2	参考系平移和转动时数值函数和算符的变换·····	84
§ 3.3	薛定谔绘景与海森堡绘景·····	86
§ 3.4	狄拉克表象理论·····	91
§ 3.5	谐振子各物理量的矩阵 湮灭算符 产生算符 粒子数算符 ·····	102
§ 3.6	谐振子的相干态 ·····	105
习 题	·····	115
第四章	混合态与密度矩阵 ·····	119
§ 4.1	纯态和混合态 密度矩阵和密度算符 ·····	119
§ 4.2	复合系密度矩阵 ·····	126
§ 4.3	恒温器中的谐振子* ·····	129
习 题	·····	137
第五章	有心力场内的运动 ·····	138
§ 5.1	球对称场内的运动(离散谱) ·····	138
§ 5.2	球对称方势阱 ·····	148
§ 5.3	库仑场 ·····	154
§ 5.4	三维各向同性谐振子 ·····	161
习 题	·····	168
第六章	角动量理论 ·····	169
§ 6.1	由对易关系建立角动量理论 上升算符 下降算符 ·····	169
§ 6.2	粒子的自旋 ·····	176
§ 6.3	角动量的合成 ·····	185
§ 6.4	电子自旋在恒定均匀磁场内的旋进 ·····	193
§ 6.5	自旋密度矩阵 ·····	198
§ 6.6	对斯特恩-盖拉赫实验的分析* ·····	203
习 题	·····	209

第七章 定态薛定谔方程的近似解法	213
§ 7.1 变分法 里兹变分法	213
§ 7.2 与时间无关的微扰论	219
§ 7.3 斯塔克效应	226
§ 7.4 二能级系统	230
§ 7.5 晶体内的电子运动*	233
§ 7.6 密度矩阵的微扰论*	245
§ 7.7 定态浸渐近似*	251
习 题	254
第八章 在磁场内的运动	258
§ 8.1 在均匀磁场内运动的粒子 朗道能级	258
§ 8.2 塞曼效应与帕邢 - 巴克效应	262
§ 8.3 原子的弱磁性*	270
§ 8.4 Aharonov - Bohm 效应	273
习 题	277
第九章 与时间有关的微扰	278
§ 9.1 与时间有关的微扰 跃迁概率 时间 - 能量不确定关系	278
§ 9.2 突发微扰 浸渐微扰	286
§ 9.3 贝里 (Barry M. V.) 相位*	292
§ 9.4 在有心场内的电偶矩跃迁	301
习 题	312
第十章 多粒子系统	315
§ 10.1 全同性原理与对称化假设	315
§ 10.2 对称态函数和反对称态函数的构成	319
§ 10.3 He 原子 H ₂ 分子	324
习 题	337

第十一章 弹性散射	339
§ 11.1 散射的基本概念	339
§ 11.2 分波法	342
§ 11.3 玻恩近似	348
习 题	356
参考答案与提示	357
附 录	442
A. 希尔伯特(Hilbert)空间	442
B. δ 函数	443
C. 合流超几何函数(Confluent hypergeometric function)	445
D. 可约化为合流超几何方程的拉革尔(Laguerre)方程、厄米(Hermite)方程	447
E. 作为合流超几何方程的贝塞耳方程	450
F. 矢量合成系数(Clebsch - Gordan 系数)	456
G. 常用物理常量	458
索 引	460
参考文献	473

第一章 量子力学的基本原理

量子力学是研究物质量子运动的科学,从它诞生到现在 80 年来,已经形成一门相当完整的理论体系.人们逐渐认识到量子力学的全部内容可以建立在几条基本原理(公设)的基础之上(虽然各书对公设的表述形式不完全一致,但基本内容相同).无数的实验事实、有关的生产原理(如原子能、半导体、激光、超导等)以及近期量子力学的进展都已证明,量子力学的结论是正确而无可质疑的.

本章先从分析典型的实验出发,对单粒子问题逐一提出三条公设.现在尚无法证明这些公设为什么正确,只能据此依靠一定的逻辑推演,得出量子力学的全部内容(对多个相同粒子所组成的系统,须另加一条公设——见第十章).

量子力学的成就科学界是公认的,但对量子力学的认识论问题尚无统一看法.待学生熟悉量子力学解决实际问题的方法之后,再来探讨这些更深层次的课题.

§ 1.1 态函数 量子力学中物理量的平均值

经典力学中作为质点的粒子,在某一时刻其运动状态用坐标和动量来描述.粒子在空间运动形成一条轨道(轨迹),运动方程的解就是这个轨迹.然而,用这种方式研究微观粒子的行为遇到了根本性的困难,对于一个量子系统(如电子),同一方向的坐标和动量

的取值是受限制的. 任意状态上的量子系统, 其坐标 x 和动量 p_x 的均方根偏差 Δx 和 Δp_x 之间有

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

这就是坐标和动量间的不确定关系, 其中

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.054\,571\,596(82) \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

为 Planck 常量. 此式表明同方向的坐标和动量在任何态上不能都取确定值. 如 x 在此态上的不确定度已知时, 此关系式便给出 p_x 不确定度的下限. 既然 x 、 p_x 在同一态上不能都取确定值, 便不能用这两个物理量来描述量子系统的状态.

建立量子力学的逻辑体系, 首先要解决的是怎样描述量子系统的状态. 为此, 我们来分析电子双缝干涉实验.

1.1.1 电子双缝干涉实验

在电子枪 S 前竖立一块带平行细缝的金属板, 两缝间的距离为 d . 在远方与金属板平行再竖立一面荧光屏. 金属板与屏间距离为 L , 且 $d \ll L$ [图 1.1 - 1(a)].

电子自电子枪发出后飞向带缝金属板, 如开放缝 1 而关闭缝 2, 电子通过缝 1 随机地打到荧光屏上. 每打一次产生一个亮点. 起初在屏上出现的亮点几乎是无规则的. 但是很多电子打到屏上便产生单缝衍射亮度的高斯分布 $\rho_1(x)$. 现在开放缝 2 而关闭缝 1. 很多电子打到屏上又产生亮度的另一个高斯分布 $\rho_2(x)$. 如果缝 1 和缝 2 同时开放, 设想电子为经典粒子, 得到总的亮度分布应为分别开放两缝时亮度分布之和 (即概率和)

$$\rho(x) = \rho_1(x) + \rho_2(x) \quad (1.1.1)$$

然而, 实际得到总的亮度不是这种概率和的分布, 却是两缝之间相

干的亮度分布[图 1.1 - 1(b)]. 不论将电子流密度减弱到何种程度, 甚至一个一个地通过细缝(当然每个电子只能通过一个细缝), 最终仍然得到双缝干涉的亮度分布. 按照经典物理的观点, 电子通过缝 1 时, 缝 2 打开与否对它不应有影响. 同样, 电子通过缝 2 时, 缝 1 的存在也不应与它有何关系. 然而, 当两缝同时开启时, 实际得到的却是相干的亮度分布. 这表明电子通过一缝时, 另一缝的开启对它有影响.

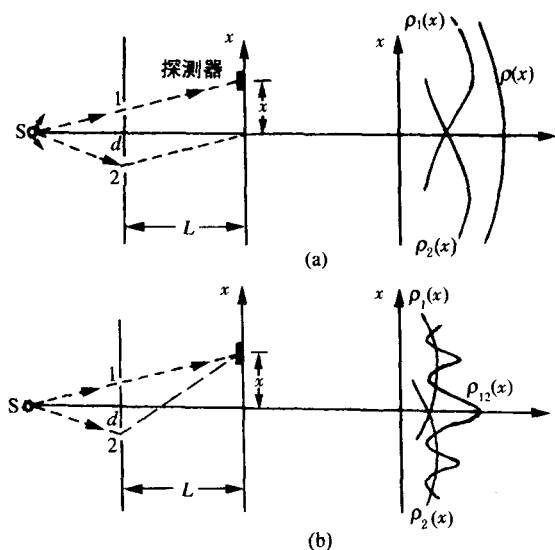


图 1.1 - 1

为了解释两缝的开启如何使电子在屏上形成相干的分布, 设想电子的概率分布可表示为概率幅(一般为复函数)的模方, 即

$$\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) \quad (1.1.2)$$

这里的 $\psi^*(x)$ 和 $\psi(x)$ 互为复数共轭. 各细缝单独传播到屏幕处电子的概率分布由各自的概率幅所构成:

$$\rho_1(x) = |\psi_1(x)|^2, \quad \rho_2(x) = |\psi_2(x)|^2$$

当同时开启两个细缝,在屏幕 x 处出现电子的概率幅为

$$\psi(x) = \psi_1(x) + \psi_2(x) \quad (1.1.3)$$

在屏幕 x 处电子的概率分布为

$$\begin{aligned} \rho(x) &= |\psi(x)|^2 = [\psi_1^*(x) + \psi_2^*(x)][\psi_1(x) + \psi_2(x)] = \\ &= |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2 + [\psi_1^*(x)\psi_2(x) + \psi_1(x)\psi_2^*(x)] = \\ &= \rho_1(x) + \rho_2(x) + 2\operatorname{Re}\psi_1^*(x)\psi_2(x) \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

如将概率幅取成所对应的模及相因子乘积的形式,即

$$\psi_1(x) = \sqrt{\rho_1(x)}e^{i\delta_1(x)}, \quad \psi_2(x) = \sqrt{\rho_2(x)}e^{i\delta_2(x)} \quad (1.1.5)$$

式中 $\delta_1(x)$ 、 $\delta_2(x)$ 分别为 $\psi_1(x)$ 和 $\psi_2(x)$ 的实相角。

(1.1.4)式不同于经典粒子的概率分布(1.1.1)式在于出现第三项 $2\operatorname{Re}\psi_1^*(x)\psi_2(x)$ 。将(1.1.5)式代入,可清楚的写出其表达式:

$$\begin{aligned} 2\operatorname{Re}\psi_1^*(x)\psi_2(x) &= 2\sqrt{\rho_1(x)\rho_2(x)}\operatorname{Re}e^{-i[\delta_1(x)-\delta_2(x)]} = \\ &= 2\sqrt{\rho_1(x)\rho_2(x)}\cos[\delta_1(x) - \delta_2(x)] \end{aligned} \quad (1.1.6)$$

(1.1.6)式中随着两个概率幅的相角差 $\delta_1(x) - \delta_2(x)$ 的变化,余弦可正、可负、可零。正的地方 $\rho(x)$ 增大,电子落点多,成为亮纹;负的地方 $\rho(x)$ 减小,电子落点少,条纹的亮度降低甚至降到最低;零的地方无干涉。对于一个电子,在亮纹处出现的概率大,在全黑的暗纹处出现的概率为零。如果电子可达到的全空间为 V ,则在 V 积分 $\rho(r)$:

$$\int_V \rho(r)dr = \int_V |\psi(r)|^2 dr = 1 \quad (1.1.7)$$

这是因为电子一定落到空间 V 内,在 V 内的概率之和为 1。 $|\psi(r)|^2 dr$ 为电子在 r 和 $r+dr$ 间隔内出现的概率。 $|\psi(r)|^2$ 更准

确地说为电子数密度。

须要指出,20世纪30年代还不掌握制作双缝衍射的实验技术,最早的电子衍射是利用天然晶体点阵(相当于多缝衍射)来实现的(G. J. Davisson, L. H. Germer, 1927). 电子双缝干涉是50年代开始陆续用人工的宏观装置完成的(G. Möllenstedt, H. Düker 1954; C. Jönsson 1961).

1.1.2 态函数

从电子双缝干涉实验的分析中我们看到:干涉是靠概率幅叠加而不是靠概率叠加. 量子力学处理此问题不同于经典力学关键的一点就在这里。

单个电子一次通过细缝而在屏上的落点显示不出规律性. 在相同的条件下,电子逐个多次通过细缝(可等价于不相相互作用的多个电子一次通过细缝)才形成干涉条纹. 所以量子力学研究单个电子,是指其多次行为的统计结果,而不回答单个电子的一次行为. 在一定状态,电子的分布概率由概率幅的模方来描述. 描述此状态的概率幅称为态函数(或波函数). “空间某处的电子数密度与该处电子态函数模方成正比”,这就是玻恩(M. Born 1926)对态函数的统计诠释,于是“用态函数描述量子系统的状态”便是量子力学的第一条基本公设. 物理系统的组分(单个或多个微观粒子)及其所处的物理条件一旦确定,我们就认为其态函数已确定. 以后,会逐渐看到如何在理论上求解态函数. 量子力学为量子系统提供的一切信息均来自于态函数。

态函数应满足的条件是态函数归一化条件[见(1.1.7)]即平方可积条件

$$\int_V |\psi(\mathbf{r})|^2 d\mathbf{r} = C \quad (1.1.8)$$

这里 $|\psi(\mathbf{r})|^2$ 是粒子相对数密度. 如将 (1.1.8) 式写成

$$\int_V \left| \frac{1}{\sqrt{C}} \psi(\mathbf{r}) \right|^2 d\mathbf{r} = 1 \quad (1.1.9)$$

式中 $\left| \frac{1}{\sqrt{C}} \psi(\mathbf{r}) \right|^2$ 就是粒子的数密度(概率密度); $\frac{1}{\sqrt{C}} \psi(\mathbf{r})$ 称为归一化态函数, $\frac{1}{\sqrt{C}}$ 为归一化系数. 如不单独声明, 通常使用的都是归一化的态函数. 在量子力学中, 计算物理量必须使用一对相互复数共轭的归一化态函数: $\psi^*(\mathbf{r})$ 、 $\psi(\mathbf{r})$. 所以, 归一化态函数只精确到任意相因子 $e^{i\delta}$ (这里 δ 是实常数). 归一化态函数这个任意常数性相因子虽然原则上不能消除, 但不影响物理量的概率分布(如概率, 各量的期望值等). 然而, 当讨论几个态函数的干涉问题时, 态函数之间的相角差便有决定性的意义[如 (1.1.6) 式].

按态函数的统计诠释, 要求态函数 $\psi(\mathbf{r})$ 是 $\mathbf{r}$ 的单值、有界和连续(个别孤立奇点除外)函数. 这是因为在空间 $\mathbf{r}$ 点有界的相对概率分布只有一种, 而且这种分布是连续变化的. 对于 (1.1.8) 式积分发散的情况, 以后另行讨论(即使发散, 相对概率也是有意义的).

实变量的平方可积复函数的全体所构成的集合(在集合内定义了内积), 在数学上称为希尔伯特(Hilbert)空间. 此无限维空间用 L_2 表示, 下标 2 代表模平方可积. 量子力学第一基本公设可表述成: 量子系统每一状态与希尔伯特空间 L_2 的一个元素(即矢量)相对应. 此空间的内积(标积)表示为

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \equiv \int \psi_1^*(q) \psi_2(q) dq \quad (1.1.10)$$

这里 $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$ 为 L_2 中任意矢量, $*$ 号代表复数共轭. (1.1.10) 式左侧的记法(狄拉克记法)代表希尔伯特空间右矢 $|\psi_2\rangle$ 与 $|\psi_1\rangle$ 所对偶的左矢 $\langle \psi_1 |$ 构成的内积. 在右矢和左矢(统称为态矢量)不再标

记态函数的自变量了. 按此定义:

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle^* \quad (1.1.11)$$

N 个微观粒子组成系统, 其归一化态函数如为 $\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)$, 则

$$\int |\psi(r_1, r_2, \dots, r_N)|^2 dr_1 dr_2 \dots dr_N = 1 \quad (1.1.12)$$

这里的积分不在 3 维而在 $3N$ 维空间进行, 这个多维的坐标空间称为量子系统的位形空间. $3N$ 维位形空间内的一个点代表 3 维空间内 N 个质点的 $3N$ 个坐标.

1.1.3 量子力学中物理量的平均值

由于粒子在 x 和 $x+dx$ 之间出现的概率为 $|\psi(x)|^2 dx$, 则粒子坐标的平均值(亦称期望值)为

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &\equiv \langle \psi | x | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \\ &\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) x \psi(x) dx \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

此式表明: $x\psi(x)$ 也是 L_2 中的一个态函数. (1.1.13) 式是 $\psi^*(x)$ 和 $x\psi(x)$ 构成的内积[对比(1.1.10)式].

同理, 坐标函数(如势能)的平均值为

$$\begin{aligned} \langle f(x) \rangle &\equiv \langle \psi | f(x) | \psi \rangle = \int_L f(x) |\psi(x)|^2 dx = \\ &\int_L \psi^*(x) f(x) \psi(x) dx \end{aligned} \quad (1.1.14)$$

L 是 $\psi(x)$ 和 $f(x)\psi(x)$ 的定义域.

例 1.1-1 设在球坐标中, 粒子态函数为 $\psi(r, \theta, \varphi)$, 试求: (1) 粒子在球壳 $(r, r+dr)$ 中出现的概率; (2) 粒子在 (θ, φ) 方向立体角元 $d\Omega$ 中出现的概率.

解 (1) 在 $(r, r+dr)$ 内出现的粒子可在任意方向, 故