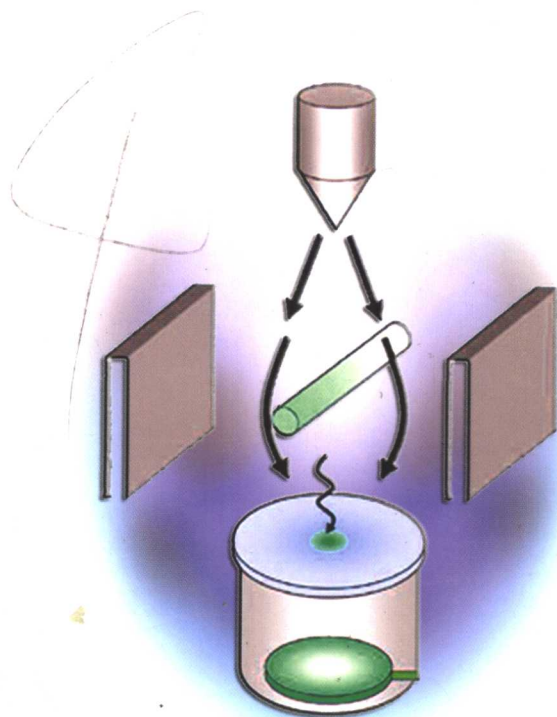


MODERN  
QUANTUM MECHANICS  
COURSE

# 现代量子力学教程

程檀生  编著



北京大学出版社  
PEKING UNIVERSITY PRESS

0413.1  
60

MODERN  
QUANTUM MECHANICS  
COURSE

现代量子力学教程



程檀生◎编著

北京大学出版社  
PEKING UNIVERSITY PRESS

## 图书在版编目(CIP)数据

现代量子力学教程/程檀生编著. —北京:北京大学出版社,  
2006. 2

ISBN 7-301-09990-8

I. 现… II. 程… III. 量子力学-高等学校-教材 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 127282 号

**书 名:** 现代量子力学教程

**著作责任者:** 程檀生 编著

**责任编辑:** 顾卫宇

**标准书号:** ISBN 7-301-09990-8/O·0674

**出版发行:** 北京大学出版社

**地 址:** 北京市海淀区成府路 205 号 100871

**网 址:** <http://cbs.pku.edu.cn>

**电 话:** 邮购部 62752015 发行部 62750672 编辑部 62752021

**电子信箱:** zpup@pup.pku.edu.cn

**排 版 者:** 北京高新特打字服务社 82350640

**印 刷 者:** 北京中科印刷有限公司

**经 销 者:** 新华书店

850 毫米×1168 毫米 32 开本 16.625 印张 430 千字

2006 年 2 月第 1 版 2006 年 2 月第 1 次印刷

**定 价:** 27.00 元

---

未经许可,不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。  
版权所有,翻版必究

## 内 容 简 介

本书意在深入浅出地介绍量子力学的概念、方法及新的进展,可作为物理学类学生及自学者的教材或参考书.全书共分十二章:第一章介绍一些经典物理无法处理的实验问题;第二章、第四章、第六章、第七章和第八章介绍量子力学的基本概念和基本方法;第三章和第五章介绍有解析解的一些问题;最后四章(第九章、第十章、第十一章和第十二章)介绍量子力学的近似方法.目录前标有\*号的章节或小字号的附注内容可作为习题课、讲座或课外阅读之用;即使无\*号标记的章节或附注,教师仍可根据同学的具体情况酌情删减.当然,本书也可作为研究生提高基础水平和教师教学的参考书.

## 前 言

在北京大学校方、北京大学物理学院和北京大学出版社的资助和支持下出版本书,我为能尽自己的微薄之力,让读者多一本可选的参考书而感到欣慰,希望本教程能使读者在学习量子力学时较容易些,特别希望他们能在学习中树立信心,引发兴趣,进而参与到量子理论研究和量子技术发展的行列中。

近 30 年来,量子物理学不论在自身的理论方面还是在技术应用方面都取得难以想象的进展,而且已扩展到很多领域和学科,如化学、生物学、生命科学、天文学、材料科学和信息科学等,极大地促进了它们的发展,成为近代科学的理论基础。许多新的实验事实,例如单电子的双缝干涉实验的成功,把读者从假想的实验事实的困境中解脱出来;扫描隧穿显微镜的发明更是把经典物理学绝不认可的隧穿效应应用于物质表面的研究。至于核磁共振成像仪的发明及其在医学上的应用以及量子计算机和量子信息的发展前景更直接表明,量子物理学是人类发展史上最光彩耀目的现代文明发展的理论基石。

本书主要介绍量子力学的基本概念和数学工具,特别是对态叠加原理、波函数、力学量算符、不确定关系和测量结果等的讨论,并时时将新的概念和结论与经典物理学的结果作比较,以使读者能正确理解量子力学的基本概念,尽快摆脱经典物理观念的约束和误导。为使读者能正确了解量子力学的精髓,我着重介绍与相位、算符和对易关系相关的内容,如绝热近似、贝利相位、阿哈朗诺夫-玻姆效应、达尔戈诺-刘易斯近似方法以及因子化方法;也增添

篇幅介绍量子力学新发展和新应用,如隧穿效应、相干态、磁通量量子化、磁共振、贝尔不等式和连续谱中的束缚态等内容.今天,量子物理学已成为进入科学和技术前沿问题研究不可或缺的基础,学习量子物理学已不再是物理类专业学生的“专利”.为此,我在论述量子力学的基本原理和推导其相关公式时有意识地详尽些,并将一些必要的辅助内容和工具编入附录,以帮助志在学习的读者提高自学效果.

在本书的编写过程中,我得到很多同仁,特别是一同教学的同事们的支持和鼓励.尤其在与杨泽森教授、林宗涵教授、宋行长教授和宁平治教授就量子力学相关问题的讨论中受益匪浅,在具体编写中得到了吴崇试教授的鼎力相助,在此一并致谢.

在本书出版前,杨立铭院士已离我们远去.他在有生之年对我的关怀和教诲是我毕生难忘的.我的点滴成果都包含了他的心血.我将永远铭记他.

在编写本书的过程中,我始终抱着对读者负责的宗旨,力求避免给读者以错误的引导或错误的结论.但由于编写的时间仓促,难免出现差错,衷心期望读者的指正.

程檀生

2005年10月于蓝旗营

# 目 录

<b>第一章 经典物理学的失效</b> .....	( 1 )
1.1 辐射的微粒性 .....	( 2 )
1.1.1 黑体辐射 .....	( 2 )
1.1.2 固体低温比定容热容 .....	( 7 )
1.1.3 光电效应 .....	( 8 )
1.1.4 康普顿散射 .....	(10)
1.2 原子结构的稳定性 .....	(12)
1.2.1 原子行星模型 .....	(12)
1.2.2 元素的线光谱 .....	(13)
1.3 物质粒子的波动性 .....	(15)
1.3.1 德布罗意假设 .....	(15)
1.3.2 物质粒子波动性的实验证据 .....	(16)
习题 .....	(19)
<b>第二章 波函数与波动方程</b> .....	(21)
2.1 波粒二象性 .....	(22)
2.2 波函数的统计解释——概率波 .....	(25)
2.3 波函数的性质, 态叠加原理 .....	(27)
2.3.1 波函数的性质 .....	(27)
2.3.2 位置和势能的平均值 .....	(30)
2.3.3 动量平均值 .....	(32)
2.3.4 态叠加原理 .....	(37)
2.4 含时间的薛定谔方程 .....	(41)
2.4.1 薛定谔方程的建立 .....	(41)
2.4.2 对薛定谔方程的讨论 .....	(44)

2.5	不含时间的薛定谔方程, 定态问题 .....	(54)
2.5.1	不含时间的薛定谔方程 .....	(54)
2.5.2	定态 .....	(55)
2.6	不确定关系 .....	(57)
2.6.1	一些例子 .....	(58)
2.6.2	一些实验 .....	(60)
2.6.3	不确定关系是波粒二象性的必然结果 .....	(62)
2.6.4	能量-时间不确定关系 .....	(63)
2.6.5	一些应用举例 .....	(65)
	习题 .....	(67)
<b>第三章</b>	<b>一维定态问题</b> .....	(69)
3.1	一维定态解的共性 .....	(69)
3.1.1	能级的简并性 .....	(70)
3.1.2	分立能级波函数的正交性 .....	(72)
3.1.3	分立能级波函数的振荡定理 .....	(72)
3.1.4	在无穷大位势下的波函数 .....	(73)
3.2	隧穿效应和扫描隧穿显微镜 .....	(75)
3.2.1	阶梯位势 .....	(75)
3.2.2	隧穿效应和扫描隧穿显微镜 .....	(77)
3.3	位垒散射 .....	(79)
3.3.1	$E < V_0$ .....	(79)
3.3.2	$E > V_0$ .....	(81)
3.3.3	结果讨论 .....	(82)
3.4	方势阱散射 .....	(84)
3.5	波包散射和时间延迟 .....	(85)
3.6	一维无限深方势阱 .....	(88)
3.6.1	能量本征值和本征函数 .....	(88)
3.6.2	结果的讨论 .....	(90)
3.7	宇称, 有限深对称方势阱, 双 $\delta$ 位势 .....	(91)



---

3.7.1	宇称 .....	(91)
3.7.2	有限深对称方势阱 .....	(93)
3.7.3	粒子在双 $\delta$ 势阱中运动 .....	(97)
* 3.8	一维谐振子势的代数解法 .....	(101)
3.8.1	能量本征值 .....	(102)
3.8.2	能量本征态 .....	(104)
3.8.3	坐标空间中能量本征态的表达式 .....	(107)
3.8.4	讨论和结论 .....	(108)
* 3.9	周期场中的运动 .....	(112)
3.9.1	能带结构 .....	(113)
3.9.2	有效质量能带结构 .....	(117)
* 3.10	相干态 .....	(118)
3.10.1	湮没算符 $\hat{a}$ 的本征态 .....	(118)
3.10.2	相干态的性质 .....	(119)
	习题 .....	(125)
<b>第四章</b>	<b>量子力学中的力学量</b> .....	(130)
4.1	力学量算符的性质 .....	(130)
4.1.1	量子力学中的力学量算符至少是线性算符; 量子力学中的方程是线性齐次方程 .....	(130)
4.1.2	算符的代数运算规则 .....	(131)
4.1.3	算符的对易性 .....	(133)
4.1.4	算符的厄米性 .....	(135)
4.2	厄米算符的本征值和本征函数 .....	(139)
4.2.1	厄米算符的本征值和本征函数 .....	(139)
4.2.2	厄米算符的本征值和本征函数的性质 .....	(143)
4.3	连续谱本征函数“归一化” .....	(146)
4.3.1	连续谱本征函数的“归一化” .....	(146)
4.3.2	$\delta$ (狄拉克)函数 .....	(149)
4.3.3	本征函数的封闭性 .....	(152)

4.4	算符的共同本征函数 .....	(154)
4.4.1	算符“涨落”之间的关系 .....	(154)
4.4.2	算符的共同本征函数组 .....	(157)
*4.4.3	角动量的共同本征函数组——球谐函数 .....	(159)
4.4.4	力学量的完全集 .....	(166)
4.5	力学量平均值随时间的变化,运动常数, 埃伦费斯特定理 .....	(168)
4.5.1	力学量的平均值随时间的变化;运动常数 .....	(168)
4.5.2	位力定理 .....	(170)
*4.5.3	能量-时间不确定关系 .....	(171)
4.5.4	埃伦费斯特定理 .....	(172)
	习题 .....	(174)
<b>第五章</b>	<b>变量可分离型的三维定态问题</b> .....	(177)
5.1	有心势 .....	(177)
5.1.1	不显含时间的薛定谔方程解在 $r \rightarrow 0$ 的 渐近行为 .....	(178)
5.1.2	三维自由粒子运动 .....	(180)
5.1.3	球方势阱 .....	(183)
5.1.4	氢原子 .....	(188)
5.1.5	类氢离子 .....	(200)
5.2	赫尔曼-费恩曼(Hellmann-Feynman)定理 .....	(203)
5.3	三维各向同性谐振子 .....	(205)
5.3.1	本征值和本征函数 .....	(205)
5.3.2	讨论 .....	(206)
5.4	带电粒子在外电磁场中的薛定谔方程, 恒定均匀场中带电粒子的运动 .....	(208)
5.4.1	带电粒子在外电磁场中的薛定谔方程 .....	(208)
5.4.2	正常塞曼效应 .....	(211)
5.4.3	带电粒子在均匀磁场中的运动 .....	(213)

5.4.4	磁通量的量子化 .....	(215)
* 5.5	连续谱中的束缚态 .....	(217)
	习题 .....	(220)
<b>第六章</b>	<b>量子力学的矩阵形式及表示理论</b> .....	(225)
6.1	量子体系状态的表示 .....	(225)
6.2	狄拉克符号介绍 .....	(227)
6.2.1	量子态, ket 矢, bra 矢 .....	(227)
6.2.2	标积 .....	(228)
6.2.3	算符及其表示 .....	(231)
* 6.3	投影算符 .....	(237)
* 6.4	表象变换, 么正变换 .....	(239)
6.4.1	同一状态在不同表象中的表示间的关系 .....	(239)
6.4.2	两表象的基矢之间关系 .....	(240)
6.4.3	力学量在不同表象中的矩阵表示之间的关系 .....	(241)
6.4.4	么正变换 .....	(241)
6.5	平均值, 本征方程和薛定谔方程的矩阵形式 .....	(243)
6.5.1	平均值 .....	(243)
6.5.2	本征方程 .....	(244)
6.5.3	薛定谔方程 .....	(249)
* 6.6	量子态的不同描述 .....	(250)
6.6.1	薛定谔绘景 .....	(251)
6.6.2	海森伯绘景 .....	(252)
	习题 .....	(256)
* <b>第七章</b>	<b>量子力学的代数方法——因子化方法</b> .....	(259)
7.1	哈密顿量的本征值和本征矢 .....	(259)
7.2	因子化方法的一些例子 .....	(262)
7.2.1	一维谐振子的本征值和本征矢 .....	(262)
7.2.2	二维谐振子的本征值和本征矢 .....	(264)
7.2.3	氢原子的能量本征值和本征矢 .....	(266)

习题.....	(269)
<b>第八章 自旋</b> .....	(271)
8.1 电子自旋存在的实验事实 .....	(271)
8.1.1 施特恩-格拉赫(Stern-Gerlach)实验 .....	(271)
8.1.2 电子自旋存在的其他证据 .....	(272)
8.2 自旋——微观客体特有的内禀角动量 .....	(273)
8.2.1 电子的自旋算符和它的矩阵表示 .....	(273)
8.2.2 考虑自旋后状态和力学量的描述 .....	(279)
8.2.3 考虑自旋后电子在中心势场中的薛定谔方程 .....	(283)
8.3 碱金属的双线结构 .....	(285)
8.3.1 总角动量 .....	(285)
8.3.2 碱金属的双线结构 .....	(291)
8.4 两个自旋为 $1/2$ 的粒子的自旋波函数 .....	(292)
* 8.5 爱因斯坦-帕多尔斯基-罗森佯谬和 贝尔不等式 .....	(295)
8.5.1 爱因斯坦-帕多尔斯基-罗森佯谬 .....	(295)
8.5.2 贝尔不等式 .....	(297)
8.6 全同粒子交换不变性——波函数具有确定的 置换对称性 .....	(302)
8.6.1 交换不变性 .....	(303)
8.6.2 全同粒子的波函数结构,泡利原理 .....	(305)
* 8.6.3 玻色-爱因斯坦凝聚 .....	(310)
8.6.4 全同粒子的交换不变性的后果 .....	(311)
习题.....	(315)
<b>第九章 量子力学中束缚态的近似方法</b> .....	(319)
9.1 定态微扰论 .....	(319)
9.1.1 非简并能级的微扰论 .....	(319)
9.1.2 碱金属光谱的双线结构和反常塞曼效应 .....	(330)
9.1.3 简并能级的微扰论 .....	(334)

---

9.2 变分法 .....	(352)
9.2.1 体系的哈密顿量在任一合理的试探波函数中的 平均值必大于等于体系基态能量 .....	(352)
9.2.2 Ritz 变分法 .....	(353)
*9.2.3 哈特里自洽场方法 .....	(358)
*9.3 达尔戈诺-刘易斯方法 .....	(360)
*9.4 双原子分子 .....	(368)
9.4.1 玻恩-奥本海默近似 .....	(368)
9.4.2 氢分子离子的能量 .....	(369)
9.4.3 双原子分子的振动和转动 .....	(373)
9.4.4 双原子分子的转动谱线的强度规律 .....	(378)
习题 .....	(379)
<b>第十章 含时间的微扰论——量子跃迁</b> .....	<b>(383)</b>
10.1 量子跃迁 .....	(383)
10.1.1 含时间的微扰论 .....	(384)
10.1.2 跃迁概率 .....	(386)
10.2 微扰引起的跃迁 .....	(390)
*10.3 磁共振 .....	(398)
*10.4 绝热近似 .....	(404)
*10.5 贝利(Berry)相位 .....	(410)
习题 .....	(416)
<b>第十一章 量子散射的近似方法</b> .....	<b>(418)</b>
11.1 一般描述 .....	(418)
11.2 玻恩近似,卢瑟福散射 .....	(424)
11.3 有心势中的分波法和相移 .....	(430)
11.4 共振散射 .....	(438)
11.5 全同粒子的散射 .....	(440)
习题 .....	(445)

<b>第十二章 量子力学的经典极限和 WKB 近似</b> .....	(448)
12.1 量子力学的经典极限 .....	(448)
12.2 WKB 近似 .....	(453)
习题 .....	(465)
<b>附录 I 数学分析</b> .....	(467)
I.1 矢量分析公式 .....	(467)
I.2 正交曲面坐标系中的矢量分析公式 .....	(468)
<b>附录 II 一些有用的积分公式</b> .....	(471)
<b>附录 III <math>\delta</math> 函数</b> .....	(474)
III.1 $\delta$ 函数的定义和表示 .....	(474)
III.2 $\delta$ 函数的性质 .....	(476)
III.3 $\delta$ 函数的导数 .....	(478)
<b>附录 IV 特殊函数</b> .....	(480)
IV.1 合流超几何函数 .....	(480)
IV.2 贝塞尔函数 .....	(482)
IV.3 球贝塞尔函数 .....	(484)
IV.4 厄米多项式 .....	(486)
IV.5 勒让德多项式和连带勒让德函数 .....	(488)
IV.6 球谐函数 .....	(494)
<b>附录 V 角动量的基本关系</b> .....	(498)
<b>附录 VI 基本物理常数表</b> .....	(509)
<b>答案和提示</b> .....	(511)
<b>参考书目</b> .....	(516)

## 第一章 经典物理学的失效

19世纪末,牛顿力学的确立,光的波动性的确定,将光和电磁现象建立在牢固基础上的麦克斯韦方程组以及统计处理规律的建立,使人们能很成功地解释观察到的绝大多数现象.于是,人们认为物理学的普遍规律似乎已非常好地被建立了:整个自然界的现象能够根据物体和场的相互作用而被适当地说明、解释和预言;物体的所有运动及在场中所有的变化被认为是连续的,可以在一定初条件下,由相应的微分或偏微分方程来计算得到;通过位置、动量和场强,整个世界可无限详尽地被完全描述;整个行为完全被确定,原则上与它是否被观察无关.

但是,经典物理学处理的仅涉及自然界中与物质的根本结构没有直接关系的问题.所以,一旦深入到分子、原子领域,人们就因一些实验事实和经典理论发生矛盾而感到困惑.但这也暗示存在一种崭新的,看起来与经典物理学完全不相容的概念,如:辐射的微粒性,物质粒子的波动性,物理量的“量子化”,即物理量的测量值取分立值或某些确定值.

由于经典物理学描述与物质基本结构没有直接关系的那些问题,并不注意对象的微观组成,而是对整体进行描述.因此,无论它的描述如何精确,也只是量子物理学的一个极限近似.所谓完全符合经典物理学的规律,也仅意味着“量子”效应在这过程中没有被察觉到.从这个意义上说,整个物理学都是量子物理学.

量子物理学中认为,一切满足普遍规律的事件,都可能发生;而经典物理学则可能认为某些过程或事件是根本不可能发生的,

如  $\alpha$  衰变, 磁通量的量子化, 等等.

应该强调指出: 量子现象的揭示是从原子、分子等微观范围的现象中开始的. 而量子物理学不仅仅支配微观世界, 同样也支配宏观世界的运动. 所以, 不应该认为“量子物理学”是某种与宏观世界问题毫无关系的规律. 事实上, 在一些宏观现象中, “量子”现象也很显著, 而经典物理学是无法描述它们的, 如: 磁通量量子化, 超导现象, 超流现象和玻色-爱因斯坦凝聚, 等等. 所以, 量子现象并不是一定仅在原子尺度下存在. 事实上, 它取决于量子现象是否能观测到(可忽略否), 取决于经典物理的近似是否适合.

今天, 据此建立起来的新的完全不同于经典物理学的量子力学(量子物理学)的规律已深入到物理学的各个领域, 并正成功地促进了天体物理、宇宙学、量子光学、凝聚态物质、化学、材料科学等基础科学研究的飞速发展. 晶体管、集成块、激光器、磁共振成像仪、扫描隧穿显微镜、光镊子、哈勃望远镜和纳米材料等的发明和制造成功, 充分展示了量子力学已成为现代文明发展的基石.

## 1.1 辐射的微粒性

### 1.1.1 黑体辐射

若照射到物体上的辐射完全被吸收, 则称该物体为黑体.

基尔霍夫(G. R. Kirchhoff)证明, 对任何一个物体, 辐射本领(radiating capacity)  $E(\nu, T)$  与吸收率  $A(\nu, T)$  之比是一个与组成物体的物质无关的普适函数(以  $f(\nu, T)$  表示), 即

$$E(\nu, T)/A(\nu, T) = f(\nu, T). \quad (1.1)$$

其中, 辐射本领  $E(\nu, T)$  为单位时间内从辐射体表面的单位面积上发射出的辐射能量的频率分布. 所以, 在  $\Delta t$  时间, 从  $\Delta S$  面积上发射出频率在  $\nu - \nu + \Delta\nu$  范围内的能量为



$$E(\nu, T) \Delta t \Delta S \Delta \nu.$$

因此,  $E(\nu, T)$  的单位为  $\text{J}/\text{m}^2$ . 可以证明, 辐射本领与辐射体的能量密度分布  $u(\nu, T)$  的关系为

$$E(\nu, T) = \frac{c}{4} u(\nu, T), \quad (1.2)$$

$u(\nu, T)$  的单位为  $\text{J} \cdot \text{s}/\text{m}^3$ .

吸收率  $A(\nu, T)$  则为照到物体上的辐射能量分布被吸收的份额. 由于黑体的吸收率为 1, 所以它的辐射本领

$$E(\nu, T) = f(\nu, T),$$

即等于普适函数(与物质无关). 一旦将黑体辐射本领研究清楚了, 也就把普适函数(对物质而言)弄清楚了.

我们也可以以  $E(\lambda, T)$  来表示辐射本领. 可以证明

$$E(\lambda, T) = \frac{\nu^2}{c} E(\nu, T). \quad (1.3)$$

$E(\lambda, T)$  的单位为  $\text{J}/(\text{m}^3 \cdot \text{s})$ .

### A. 黑体的辐射本领

实验测得黑体辐射本领  $E(\lambda, T)$  与  $\lambda$  的变化关系(见图 1.1). 而在理论上, 人们有

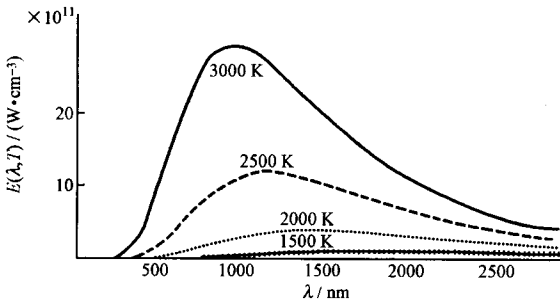


图 1.1 实验得出的  $E(\lambda, T)$  随  $\lambda$  的变化

(i) 维恩(Wien)公式: 维恩(W. Wien)根据热力学第二定律,