

量子力学

(上册)

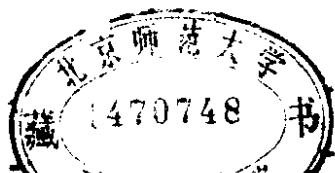
姚玉洁 主编

吉林大学出版社

量子力学

(上册)

姚玉洁 主编



量子力学

(上册)

姚玉洁 主编

吉林大学出版社出版 吉林省新华书店发行
长春市全安印刷厂印刷

850×1168 大32开 41.8125印张 294 000字

1988年6月第1版 1988年11月第1次印刷

印数：1—2 400册

ISBN 7-5601-0104-6/O·22

定价：2.55元

前 言

如果说二十世纪的前二、三十年，量子力学为少数物理学家所开创，处于它形成的时代，那么，八十年代的今天，量子力学已经进入了广大自然科学工作者都需要应用它的时代。而且，可以预见，在不太远的将来，量子力学将会进入一般人的普通常识的范畴之中。

无疑，作为综合性大学物理系基础课之一的量子力学，在对学生的综合培养和全面提高其物理素质的过程中，起着重要的作用。

本书是作者在长期教学过程中形成的。注重知识的传授和学习，重视能力的培养和提高，这是作者从事教学工作和撰写本书所遵循的基本原则。

量子力学具有更大的抽象性和概括性，它相当完美地体现了人们用数学语言恰当而准确的反映物理思想的能力。本书一方面重视对某些理论内容的比较深入的论述，另一方面也重视运用概念和规律解决问题的能力培养。

随着我国研究生制度的逐渐发展，有不少大学生希望能够攻读硕士学位，因此他们需要使自己的学习适应研究生的入学考试，而要做到这一点，能力的培养就更显得迫切和重要了。

在量子力学教和学的过程中，培养能力的重要途径之一就是解算习题，强化训练，更何况有不少好的典型的习题正是在实际物理图象的基础上引伸出来的。通过做题，不但能够判断和鉴别学生的理解能力，而且能够让学生明白如何依靠自己的力量培养和独立思考的能力，进而培养正确的思维方法，使其在弄通纵关系的基础上，深化对物理问题的认识。

鉴于以上考虑,本书各章(除一、二章外)均分为I、II两部分,分别论述基本理论和计算方法。

I 作为基本理论部分,对于基本概念和基本运动规律,力求讲细、讲深、讲透,而且在分析和论述过程中,只要不是太冗繁,则尽力与认识的思维过程相联系。对某些问题的深入论述,则采取提纲挈领、言之未尽的办法,为学生进一步思考和学习打下初步的基础。

本书利用总结、列表及小结等形式,对所学内容进行概括、归纳,以达到突出重点的目的。

II 作为计算方法的指导部分,是在习题课材料基础上修改、补充而形成的,它包括解题指导、例题和习题。

书中的例题与习题,主要选自国内外习题集及研究生入学试题,还有一些是根据学生常见的错误和疑难问题加以编纂的。

使用本书时,I和II部分可分别使用。I可作为讲授教材,II可作为习题课教材。如需统一使用,则应按学时安排,恰当取舍。本书在编写时,已注意到了内容安排上的适当灵活性。

本书第I部分由姚玉洁编写;第II部分中第三、五、十、十一章由刘曼芬编写;第四、七章由赵国权编写;第六、八、九章由井建功编写。

作者在教学过程中曾得到骆兴业、董庆德等同志的帮助,谨此致谢!

作为教材,在多年使用的过程中,得到广大同学的热情支持。正是由于他们中的许多人的提问、讨论和习题解答,致使作者得到不少启示,无疑这对本书目前体系的形成及早日脱稿都起了很好的作用。在此谨对他们表示谢意。

由于作者水平所限,书中会有不少缺点和错误,恳请读者斧正赐教!

作者

1987年5月

目 录

(上册)

第一章 引 论	1
§ 1 量子力学的主要研究课题和简单的历史回顾	1
§ 2 光的波动-微粒两相性	3
§ 3 原子结构的波尔 (Bohr) 理论	16
§ 4 实物粒子的波动-微粒两相性	21
小结	24
习题	25
第二章 波函数和薛定格 (Schrödinger) 方程	28
§ 1 状态和波函数	28
§ 2 状态叠加原理	38
§ 3 薛定格方程	40
§ 4 几率流密度与粒子数守恒定律	47
小结	51
习题	51
第三章 定态薛定格方程及一维定态问题	53
I	
§ 1 定态薛定格方程	54
§ 2 波函数自然条件的补充说明	61
§ 3 梯形位	63
§ 4 隧道效 (tunnel effect)	66
§ 5 一维无限位阱	70

§ 6	方形位	93
§ 7	δ 位	94
§ 8	线性谐振子	95
§ 9	定态薛定格方程的定性讨论	97
小结		97
II		
§ 1	定性知识对处理定态问题的指导意义	98
§ 2	周期位和能带理论	103
习题		114

第四章 量子力学中的力学量123

I

§ 1	力学量和线性厄米算符	123
§ 2	力学量取确定值的态	128
§ 3	展开假定测量和连续谱	144
§ 4	平均值和测不准关系	153
§ 5	力学量随时间的变化	168
§ 6	完整力学数量组(力学量的完全集合)	182
§ 7	守恒量及对称性	186
小结		196

II

§ 1	算符的一般运算规则	197
§ 2	算符函数与算符的导数	205
§ 3	展开假定的应用	212
习题		223

第五章 中心力场问题 231

I

§ 1	粒子在中心力场中运动的一般描述	231
§ 2	球方位阱	238
§ 3	氢原子	238

§ 4	三维各向同性谐振子	255
小结		260
II		
§ 1	径向方程的求解	260
§ 2	两个公式	265
习题		272

第六章 表象理论

I

§ 1	态的表象	276
§ 2	力学量算符的表象 (矩阵表示)	281
§ 3	量子力学公式的矩阵表示	286
§ 4	狄拉克 (Dirac) 符号	294
§ 5	量子力学中的数学基础	305
§ 6	本征问题	306
§ 7	某些应用	313
§ 8	表象变换	334
§ 9	海森堡 (Heisenberg) 图象及薛定格图象	338
小结		342

II

§ 1	坐标表象和动量表象	343
§ 2	能量表象	346
§ 3	表象变换	351
§ 4	图象	356
习题		359

第一章 引 论

本章的目的是通过对“原子物理”的某些内容的复习来理解量子现象的基本特征：“波动-微粒”两相性和量子化。为此，我们将不侧重数学处理上的完整和严格，而是结合科学史的某些资料，将重点放在对物理思想的论述上。

§1 量子力学的主要研究课题和简单的历史回顾

量子力学是在19世纪末与20世纪初萌芽并发展的，它是近代科学的重要分支。

19世纪以前，物理学主要研究两种基本的自然力——引力和电磁力，相应地产生和形成了经典力学、经典电动力学。它们与热力学和统计力学合在一起，统称为经典理论。

经典理论研究的对象主要是以看得见、听得到或摸得着的自然现象为主，即以那些平常能够直接感觉到的实物和光，以及宇宙中的行星、恒星等“宏观物体”为研究对象。当我们把经典理论应用到这些客体上时，我们试图描述的仅仅是体系行为的某些总的特征，也就是说，经典理论所概括的仅是有限领域中的实验事实。

事实上，19世纪末人们就发现了一系列的实验现象，它们是根本无法用经典理论解释的。

譬如说，人们一直认为构成宏观物体的最小单元是一颗颗坚硬的不可分割的原子。原子有大小，有重量，却无内部结构。但是，1895年发现X射线，1896年发现放射性物质，1897年发现比原子还小的电子。这说明了原子不是不可分割的，它们可以由一种元素的原子变成另外一种元素的原子。原子是有内部结构的，

是可以再分的。这些发现极大地促进了人们去探讨原子的内部结构，从而把研究的触角伸入到了 10^{-10}m — 10^{-15}m 的尺度之中，即伸入到了通常所说的“微观客体”中去了。事实上，正是这三大发现揭开了近代物理的序幕。

再譬如，黑体辐射、光电效应、康普顿(Compton)散射等实验现象都无法用经典理论解释。

面对着凡此种种的实验事实，人们并没有望而生畏、却步不前，而是从1900年开始，继之三十年之久，以极大的步伐推进了理论的进展，使物理学发生了巨大的飞跃，产生了与“相对论”并列为近代物理两大支柱的“量子论”。

物理学的基本研究课题是发现支配着自然界事物动态的基本自然规律，并以此来解释那些已观察到的自然现象和预言未知的自然现象。

量子物理学是研究有关量子现象的物理学，现在公认的它的基本数学理论称之为量子力学。但是，不能误认为量子力学规律与宏观世界毫无关系。事实上，量子力学的规律不仅支配着微观世界，也支配着宏观世界。在这种意义上，所有的物理学都是量子物理学，经典理论乃是它的一种近似。在大量宏观现象中，由于没有直接涉及到物质的微观组成问题，因此量子效应不显著，如行星绕太阳的运动，经典力学则是个较好的近似。但是，即使对某些宏观现象，量子效应也会直接、明显地表现出来，如超导现象，金属中的电子气运动的量子效应就不容忽略。因此，不应以“宏观”、“微观”作为经典力学与量子力学适用范围的分界线，而应根据量子效应重要与否来加以判断。众所周知，光速作为一个基本常数，为我们提供了一个简单而自然的判据，以区分“相对论”和“非相对论”的界线。我们要问，是否也存在着一个类似光速那样的自然常数，可以用它简洁地建立一个判据，来判断什么时候必须应用量子力学，什么时候应用经典理论就够了。这样一个常数确实存在，它就是普朗克(planck)常数，用 h 来

标志。它是一个非常小的数，量纲与角动量相同，即为“作用量纲”。

任何一个物理体系，都有一系列表征其状态的变量，称之为动力学变量，如坐标、动量、角动量、能量等等。

凡具有“作用量纲”的动力学变量，若其数值可以与 h 相比，则该体系的行为必须在量子力学的框架中描述；若该变量用 h 来度量时非常之大，则经典物理的定律就足够精确有效了。例如，我们今天描述摆的运动的方法并不因为创立了量子力学而与19世纪所用的方法有所区别，原因是摆锤的具有与 h 同量纲的量，最小也是 h 的 10^{26} 倍，因此用经典理论就足够了。

量子力学乃是统计的理论（这正是它与经典力学的根本区别之一），这一点将在下章中讨论。

还应加以说明的是我们在本书中所涉及到的仅是量子力学的非相对论部分。

总之，量子规律的被揭示，使人们对自然界认识的深度前进了一大步。量子力学所涉及的规律极为普遍，它不仅已深入到物理学的各个领域，而且还深入到了化学、生物学等领域中。

为了让读者了解量子的概念究竟是如何产生的，我们将在千千万万的量子现象中，选出以下三个方面的问题来说明。这三个方面的问题之所以被选出来，是因为它们以特别鲜明的形式说明了经典理论陷入的绝境和产生量子概念的必然性。

§ 2 光的波动-微粒两相性

光的波动性早在17世纪就已被发现。人们从实验和理论两个方面（光的干涉、衍射等现象和光的电磁理论）都已充分肯定了光具有波动性。

从历史上看，最早牛顿力主光是微粒。当时用他建立的微粒说确实解释了一些实验现象。但是由于微粒说解释不了后来发现

的光的干涉、衍射现象，而被渐渐抛弃。牛顿去逝后大约100年，光的波动说就占了优势。麦克斯韦理论建立后，微粒说就彻底被波动说代替了。

实际上，“光要么是微粒，要么是波动”的认识是片面的。

本节略述三个实验现象：黑体辐射、光电效应和康普顿散射，由此引出两个基本概念：能量子和光量子，继而给出两个假说：能量子假说和光量子假说，最后给出光的波动-微粒两相性的结论。

一、黑体辐射和普朗克能量子假说

普法战争之后，德国迅速地由一个农业国变成了钢铁工业国。由于精炼钢铁需要高温，就必须改进加热技术。为此需知铁在什么温度下发出什么颜色的光。光由波长（或频率）标志。这样，工业生产本身就提出了一个重大的理论问题：光的波长与温度有什么关系？

柏林“德意志国立物理工业研究所”二十五岁的青年维恩（wien）于1893年发现了一条重要法则：“物体发光，其中最强光波长与物体的温度成反比。”用数学语言表达就是

$$\lambda_{m,xx} \cdot T = \text{常数} \quad (1)$$

其中， $\lambda_{m,xx}$ 是最强光的波长， T 是温度。

在任何温度下，任何物体一般来说都会发射不只一种波长的光，其中最强的光决定了发光时物体的颜色。维恩法则正确地反映了这样的经验事实：随着温度的升高，物体发出的光的颜色依次由红橙黄绿青蓝到紫……，即逐渐变化到短波长的颜色。

为了确切地说明这样的实验规律，我们应该找到一种物体，能给出波长与温度的单纯关系而与它自己的特性无关。我们还知道：物质吸收的光与发射的光相同。因此，要找出一种不受自身特性干扰的光源，只要找一种能发出所有光的光源就可以了，也就是要找一种能吸收所有光的物体，这就是所谓“黑体”。维恩

设计的黑体是一个内部呈黑色且光滑的开着小孔的空盒子。光线由小孔射入，在腔内经过多次反射将会被完全吸收掉，见图1.1。

维恩提供的黑腔，确实证实了他的发现，但黑腔实验所表现的许多事实，用已有的理论无法加以解释。摆在人们面前的任务是：推出一个与实验符合的理论公式。

因为实验上测得的是能量，因此，维恩的法则可以通过能量与波长的关系等价地反映出来。

设有一个空腔，其周壁的温度为绝对温度 T 。腔壁因受热而辐射，经过空腔内壁的来回反射而再次被腔壁吸收。当辐射和吸收达到平衡时，考察存在于空腔中的光谱。

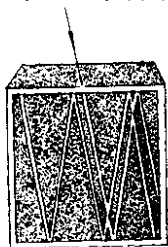


图 1.1

处于高温下的物体表面会发出各种波长的光。实验证实，在发出的各种光中，具有能量最大的光的波长 $\lambda_{\max}$ 仅与 T 有关，与空腔的形状及构成空腔的物质无关。在图1.2中， E_λ 表示单位时间内通过单位面积在单位波长间隔中发出的辐射能量， $T_1 > T_2$ 。当 T 不变时，无论怎样改变空腔的形状或材料，曲线形状保持不变。只是随着 T 的增加， $\lambda_{\max}$ 将向减小的方向移动。为了解释这样的实验事实，当时提出了两种理论公式：一种是维恩公式，这个公式给出来的理论结果仅在高频（短波）部分与实验相符，低频（长波）时明显不符。另一种是瑞利-金斯（Rayleigh-Jeans）公式，这个公式给出来的理论结果仅在低频部分与实验相符，高频时完全不符。甚至此公式给出能量在高频时将趋于无穷大。能量在一次紫外辐射猝发时将会全部被放出，此即为

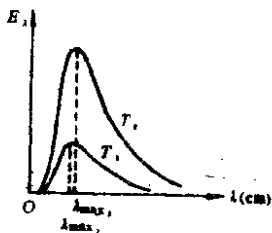


图 1.2

“紫外灾变”。

两种理论公式各自对了一半，说明理论任务并没有完成。柏林大学的普朗克教授就在这种背景下于1900年开始了关于黑体辐射的研究。在研究的初期，确实找到了一个独立的公式，这个数学公式在低频时正像瑞利-金斯公式，在高频时正像维恩公式。于是在1900年10月19日普朗克向德国物理学会提出了他的学术报告。之后鲁宾等实验科学家再次做实验核对此公式，结果发现它以惊人的准确性与实验符合。这说明普朗克找到的这个公式是正确的。但是当时这个公式纯粹是一个经验的公式，因此对这个正确的但却是经验的公式必须给以某种基本的理论证明。于是普朗克开始了艰巨的研究工作。他发现如果按照惯例——按经典理论的作法，则一事无成，永远推不出他要的公式。普朗克作了一个特别关键的假定，从而背离了经典物理学，终于给出了一个基本的理论证明，于1900年12月14日提出了著名的普朗克辐射公式。

1. 普朗克假定

下面我们用一个比较形象的比喻来说明“普朗克假定”的基本思想，借以强调“量子”概念的精髓。

在古代，人们希望从理论上计算一个圆的圆周长，但是当时人们还不会计算连续平滑的曲线的长度，只会计算线段的长度。于是人们把圆周分成四边形、八边形、十六边形……等多边形。随着边数越来越多，边就会越来越短，这样边的总长就越来越接近圆的周长。数学上的做法是先算每边边长，然后将所有边加起来，完成了一般计算之后，再让公式中的边数无限增多，就象突然将尖角展开一样，这样就把一个平滑的连续的圆周长计算出来了，从而得到了计算圆周长的一般的公式。这实际上正是微积分的思想。这种手法的关键在于：首先把连续的圆周变成不连续的具有尖角的多边形，然后再把尖角展开，由不连续再次变成了连续。普朗克在1900年做的工作就类似于此。

1900年以前，已经有了振子的概念。一块物质可以用无数个有节奏地、上下跳动的粒子代表，这些粒子叫振子。按照经典理论，这些振子所具有的能量（从而其振动的振幅）可以连续地增加，也可以连续地减少，即给物质加热或用强光照射时，这些振子可以吸收任意值的热能或光能，从而使振动加剧，而在振动程度降低时则可以放出任意值的能量。这里的关键在于，按经典理论，这些振子吸收或放出的能量值可以连续变化。就是说，这些振子的振幅、频率可以连续取值，连续变化。如黑腔被加热，则构成黑腔物质的振子可以吸收任意数量的热能，从而黑体变热。普朗克就是利用这种思想来计算黑体在任意温度下怎样吸收和怎样放出能量的。他认为黑体辐射能量就象一个圆的圆周一样，可以连续、平滑地变化，于是利用上面讲的办法，把平滑连续的能量变化改换成会计算的“突然”的变化，这样普朗克就提出了一个基本的假定：

物质中的振子不能随便处于任意能量状态，它们只能处于某些特定的能量状态。这些状态的能量是某一个最小能量 ϵ 的整数倍，即这些振子只能吸收或放出以下能量：

$$\epsilon, 2\epsilon, 3\epsilon, \dots, n\epsilon, \dots \quad (n \text{ 为任意正整数})$$

ϵ 的大小与振子的频率有关。

这些能量的特点是具有“不连续”性。在放出或吸收这些能量时，振子将从这些状态之一“飞跃”到另一状态。

普朗克在上述假定下推出下面的公式：

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^3 h}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1} \cdot d\nu \quad (2)$$

其中 ν , ρ , c , h , T 分别是通常意义下的频率、相应的能量密度、光速、玻尔兹曼常数和绝对温度。公式中的 h 就是普朗克常数，我们将在后面进行讨论。

普朗克基本假定的精髓可以通俗地说明如下：一个频率为 ν 的振子，只能够吸收或放出成“捆”的能量。每一捆的能量 $\epsilon = h\nu$ 。

低频时振的能量小，高频时振的能量大。当振子的频率一定时，每振的能量 ϵ 就定了，因此一个低频率的振子很轻易地就可以找到它的“振”所需要的能量，但高频率时就困难多了。这样就可以很容易解释“紫外灾变”的问题了。

普朗克把这种“振”称作一个能量子，能量子具有的能量为

$$\epsilon = h\nu \quad (3)$$

普朗克根据能量子假说，推出了与实验惊人符合的公式

$$\frac{\lambda_{\max}}{c} \cdot kT = 0.2014h \quad (4)$$

2. 普朗克常数 h

这是物理学的一个基本常数，它是近代物理的标志之一。

其值为

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1.055 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$$

h 的量纲，可以直接从(4)式看出来。由于波长的量纲 $[\lambda]$ 是长度， kT 的量纲 $[kT]$ 是能量，光速 c 的量纲 $[c]$ 是 (长度 · 时间⁻¹)，因而 h 的量纲是 (能量 · 时间)，在国际单位制中

$$[h] = [\text{J} \cdot \text{s}]$$

即 h 的量纲等于角动量的量纲，也叫“作用量纲”。

在物理学中“量纲”的问题是十分重要的。用量纲的方法我们还有可能判断出某些公式的基本结构来。让我们以普朗克辐射能量公式为例来说明这一点（当然，历史上并不是这样得到普朗克公式的，在这里仅以此例强调指出“量纲”的作用）。

由于我们研究的黑体辐射是光辐射问题，因此辐射能量 ρ （单位体积的能量）必与光速 c 有关，因为这是个热力学问题，所以 ρ 必与 kT 有关；又这涉及到振子振动，因此 ρ 应与频率 ν 有关；辐射场是量子化体系，故 ρ 与 h 有关；实验证实 ρ 与构成黑体的物质无关，因此 ρ 应与物质的质量、电荷无关。总之， ρ 与 c, kT, h, ν

有关。在国际单位制中，它们的量纲分别为

$$[\rho] = [J] [m^{-3}]$$

$$[kT] = [J]$$

$$[c] = [m] [s^{-1}]$$

$$[\nu] = [s^{-1}]$$

$$[h] = [J] [s]$$

若要构成一个公式，该公式两边的量纲要相等。因为

$$[c^{-3} \nu^3] = [m^{-3}]$$

$$[h d\nu] = [J]$$

$$[h\nu/kT] \text{ 无量纲}$$

所以 ρ 的公式的大致结构应该是

$$\rho \sim f(h\nu/kT) h\nu^3/c^3 d\nu$$

$f(h\nu/kT)$ 表示 $(h\nu/kT)$ 的某一函数（实际上是 $(e^{h\nu/kT} - 1)^{-1}$ ）。

普朗克在推导出正确的公式时，把原来认为是连续平滑的变化改换成他可以计算的间断的变化。在完成计算后发现，假若他按照一贯的老办法，把能量的这种“突变”再展开成为连续的变化，他就马上回到了最早的状态——又会得不到正确的公式。面对这种不平常的状况，普朗克足足有四年之久奋力设法把突变展匀而又不致牺牲答案，但所有的努力都是徒劳的。也就是若再回到经典的情况去，则他所有的工作都将被推翻。直到1905年爱因斯坦的一项重大研究成果，才有力地支持了“能量子假说”。

二、光电效应和爱因斯坦 (Einstein) 光量子假说

1. 光电效应

如图1.3所示，一个真空管带有两个电极，与外面的电路相连。阳极是由某种金属（如钠 Na）构成。实验发现，当一束紫光照到阳极表面时，将从阳极跑出电子。由于这些电子是由光引发的，因此又叫“光电子”。尽管电子本身带负电，它却能够向