



理论物理第六册

量子力学

(甲 部)

吴大猷

理论物理第六册
量子力学(甲部)

吴大猷著

科学出版社

1984

内 容 简 介

本书为著名物理学家吴大猷先生的著述《理论物理》(共七册)的第六册。《理论物理》是作者根据长期所从事的教学实践编写的一部比较系统全面的大学物理学教材。本册内容共分十三章：第一、二章主要介绍矩阵力学，第三、四两章介绍波动力学，第五章为量子力学的结构，第六、七两章讲述微扰理论，第八至第十三章讲述原子及分子的量子力学的基础知识。在大多数章节之后还附有附录和习题供读者研讨和学习。

本书根据台湾联经出版事业公司出版的原书翻印出版，作者对原书作了部分更正，李政道教授为本书的出版写了序言，我们对原书中一些印刷错误也作了订正。

本书可供高等院校物理系师生教学参考，也可供研究生阅读。

理论物理第六册 量子力学(甲部)

吴大猷 著

*

科学出版社出版

北京朝阳门内大街137号

国防工业出版社印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1984年3月第 一 版 开本：850×1168 1/32

1984年3月第一次印刷 印张：17 1/2 插页：精 2 平 4

统一书号：13031·2198

本社书号：3004·13-3

定价：布面精装 4.90 元
定价：压膜平装 4.20 元

序言

吳大猷先生是國際著名的學者，在中國物理界，是和嚴濟慈、周培源、趙忠堯諸教授同時的老前輩。他的這一部《理論物理》，包括了“古典”至“近代”物理的全豹。1977年初，在台灣陸續印出。這幾年來對該省和東南亞的物理教學界起了很大的影響。現在中國科學院，特別是由於盧嘉錫院長和錢三強、嚴東生副院長的支持，決定翻印出版，使全國對物理有興趣者，都可以閱讀參考。

看到了這部巨著，聯想起在1945年春天，我初次在昆明遇見吳老師；很幸運地得到他在課內和課外的指導，從“古典力學”學習起至“量子力學”，其經過就相當於唸吳老師的這套叢書，由第一冊開始，直至第七冊。在昆明的這一段時期是我一生學物理過程中的大關鍵，因為有了紮實的根基，使我在1946年秋入芝加哥大學，可立刻參加研究院的工作。

1933年吳老師得密歇根大學的博士學位後，先留校繼續研究一年。翌年秋回國在北大任教，當時他的學生中有馬仕俊、郭永懷、馬大猷、虞福春等，後均致力物理研究有成。抗戰期間，吳老師隨北大加入西南聯大。這一段時期的生活是相當艱苦的，但是中國的學術界，還是培養和訓練了很多優秀青年。下面的幾

段是錄自吳老師的《回憶》一書：

“組成西南聯大的三個學校，各有不同的歷史。……

北京大學規模雖大，資望也高，但在抗戰時期中，除了有很小數目的款，維持一個‘北京大學辦事處’外，沒有任何經費作任何研究工作的。在抗戰開始時，我的看法是以爲應該爲全面抗戰，節省一切的開支，研究工作也可以等戰後再作。但抗戰久了，我的看法便改變了，我漸覺得爲了維持從事研究者的精神，不能讓他們長期的感到無法工作的苦悶。爲了培植及訓練戰後恢復研究工作所需的人材，應該在可能情形下，有些研究設備。西南聯大沒有此項經費，北大也無另款。……我知道祇好儘自己個人的力量做一點點工作了。……請北大在崗頭村租了一所泥牆泥地的房子做實驗室，找一位助教，幫着我把三稜柱放在木製架上拼成一個最原始形的分光儀，試着做些‘拉曼效應’的工作。

“我想在二十世紀，在任何實驗室，不會找到一個拿三稜柱放在木架上做成的分光儀的了。我們用了許多腦筋，得了一些結果。……

“1941年秋，有一位燕京大學畢業的黃昆，要來北大當研究生隨我工作，他是一位優秀的青年。我接受了他，讓他半時作研究生，半時作助教，可以得些收入。那年上學期我授‘古典力學’，下學期授‘量子力學’。班裏優秀學生如楊振寧、黃昆、黃授書、張守廉等可以說是一

個從不易見的羣英會。……

“1945 年日本投降前，是生活最困難的時期。每月發薪，紙幣滿箱。因為物價飛躍，所以除了留些做買菜所需外，大家都立刻拿去買了不易壞的東西，如米、炭等。……我可能是教授中最先擺地攤的，……抗戰初年，託人由香港、上海帶來的較好的東西，陸續的都賣去了。等到 1946 年春復員離昆明時，我和冠世的東西兩個手提箱便足夠裝了。”

就在 1946 年春，離昆明前吳老師還特為我們一些學生，在課外另加工講授“近代物理”和“量子力學”。當時聽講的除我以外，有朱光亞、唐敖慶、王瑞駛和孫本旺。

在昆明時，吳老師為了北京大學的四十週年紀念，寫了《多原分子的結構及其振動光譜》一書，於 1940 年出版。這本名著四十多年來至今還是全世界各研究院在這領域中的標準手冊。今年正好是中國物理學會成立的五十週年，科學出版社翻印出版吳大猷教授的《理論物理》全書，實在是整個物理界的一大喜事。

李政道

1982 年 8 月

寓於瑞士日內瓦

總序

若干年來，由於與各方面的接觸，筆者對臺灣的物理學教學和學習，獲有一個印象：（一）大學普通物理學課程之外，基層的課程，大多強納入第二第三兩學年，且教科書多偏高，量與質都超過學生的消化能力。（二）學生之天資較高者，多眩於高深與時尚，不知或不屑於深厚基礎的奠立。（三）專門性的選修課目，琳瑯滿目，而基層知識訓練，則甚薄弱。

一九七四夏，筆者擬想以中文編寫一套筆者認為從事物理學的必須有的基礎的書，翌年夏，得褚德三、郭義雄、韓建珊（交通大學教授）三位之助，將前此教學的講稿譯為中文，有（1）古典力學，包括 Lagrangian 和 Hamiltonian 力學，（2）量子論及原子結構，（3）電磁學，（4）狹義與廣義相對論等四冊。一九七六年春，筆者更成（5）熱力學，氣體運動論與統計力學一冊。此外將有（6）量子力學一冊，稿在整理中。

這些冊的深淺不一。筆者對大學及研究所的物理課程，擬有下述的構想：

第一學年：普通物理（力學，電磁學為主）；微積分。

第二學年：普通物理（物性，光學，熱學，近代物理）；高等微積分；中等力學（一學期）。

第三學年：電磁學（一學年）及實驗；量子論（一學年）。

第四學年：熱力學（一學期）；狹義相對論（一學期）；量子力學（引論）（一學年）。

研究院第一年：古典力學（一學期）；分子運動論與統計力學（一學年）；量子力學（一學年）；核子物理（一學期）。

研究院第二年：電動力學（一學年）；專門性的課目，如固體物理；核子物理；基本粒子；統計力學；廣義相對論等，可供選修。

上列各課目，都有許多的書，各有長短。亦有大物理學家，集其講學精華，編著整套的書，如 Planck, Sommerfeld, Landau 者。Landau-Lifshitz 大著既深且博，非具有很好基礎不易受益的。Sommerfeld 書雖似較易，然仍是極嚴謹有深度的書，不宜輕視的。筆者本書之作，是想在若干物理部門，提出一個綱要，在題材及著重點方面可作為 Sommerfeld 書的補充，為 Landau 書的初階。

筆者深信，如一個教師的講授或一本書的講解，留給聽者或讀者許多需要思索、補充、擴展、涉獵、旁通的地方，則聽者讀者可獲得較多的益處。故本書風格，偏於簡練，課題範圍亦不廣。偶以習題的方式，引使讀者搜索，擴大正文的範圍。

筆者以為用中文音譯西人姓名，是極不需要且毫無好處之舉。故除了牛頓，愛恩斯坦之外，所有人名，概用西文。*

* 商務印書館出版之中山自然科學大辭典中，對 Barkla, Blackett, Lamb, Bloch Brattain, Townes 譯為巴克納，布拉克，拉目，布勞克，布勞頓，湯里士，錯誤及不準確可見。

·總序·

本書（第一，二，三，四冊）得褚德三，郭義雄，韓建珊三位交通大學教授之助，單越（清華大學）教授的校閱，筆者特此誌謝。

吳大猷

1977年元旦

本冊前言

本書“理論物理”的第一，三，五冊，述古典動力學，電磁學，熱力學，氣體運動學，統計力學，這些是古典物理的基礎，大部都是完成於第十九世紀中末葉的。到了第二十世紀初年，物理學有兩個基本性的創新發展。一是相對論（見本書第四冊），一是量子論（見本書第二冊）。但量子論仍未能完全由古典物理的觀念脫穎而成一完整的理論系統。到了二十年代的中葉，量子力學有如新星的爆發，法國的 de Broglie，德國的 Heisenberg，Born，瑞士的 Schrödinger，英國的 Dirac，於二三年間，由新穎的創想，數學形式的建立，以至物理意義，哲學解釋，整個新理論的系統，皆完成無遺。五十餘年來，量子力學的應用，由初期提供其發展的原動力的原子問題，擴及分子，固態，量子化學，核子的領域，可謂皆得滿意的結果。^{*}

學或教量子力學，通常似有兩個不同的態度及方法，一是由目前已建立的系統的數學的形式的方法入手，這個途徑，可以 Dirac 的 *The Principles of Quantum Mechanics* 為代表。一

* 由量子力學推展到量子化的場論，由三十年代初開始，至四十年代中末葉，而大有進展。日本之朝永振一郎，美國之 J. Schwinger, R. Feynman 展開 (Lorentz) 協變的場理論，加上前此的 Kramers 的質量重歸一法，解答了若干電磁場與電子交互作用問題。惟至目前止，特殊相對論與量子力學的一元化，似尚未有完全的理論。

是採沿着量子力學發展的過程，而進入目前的階段。作者由自己學或教的經驗，以為前者有演繹方法的清晰的好處，但大多數的初習者，會感覺到抽象的數學形式和物理觀念間的關係的神秘性，不知這樣一個抽象的理論系統是如何建立的。另一方法的極端，是學習了量子力學的應用和計算，對量子力學的基本觀念和假定的性質，不甚注意。

本冊係本書的第六冊，係量子力學的甲部，將採一個“兼併”或“折中”的寫法，兼顧量子力學發展的過程，新穎理論的線索，及量子力學的公理式系統結構。第一章述 Heisenberg 新理論的出發點，和矩陣代數。第二章乃述矩陣力學。此二章實在包括了量子力學精華的一個特別表象。第三章述 de Broglie 和 Schrödinger 的新理論的出發點，第四章詳述 Schrödinger 波動力學。此章著重 Einstein-de Broglie 關係的基本重要性。由之可導出對易關係及測不準原理。

第五章是根據前四章的背景，建立一個公理式的量子力學系統。先再總結其“物理的基礎”，次乃引入其基本假定。此章中引入較矩陣及微分更一般性的數學形式，使二者皆為此理論的二特例。讀者宜重讀第一章第3至第6節。

第五章引入 Dirac 的 ket 符號。第3，4節宜參讀 Dirac 書（其第一至五章）。第5節略述 Einstein 對量子力學的觀點。第6節述密度矩陣。第7節述量子力學的表象和度量。

第六，七章藉微擾理論，討論若干問題，第八，九，十章討論原子的結構；第十一章分子的電子結構；第十二章二原分子的

振動，轉動及原子核自旋的對稱性；第十三章多原子的振動，轉動。這六章可視為原子及分子的量子力學的基礎知識。本冊用約百分之四十的篇幅於原子與分子者，一則此二部門本身的重要，及其結果與方法於其他部門物理——如化學，固態物理，原子核結構等——的密切關係，一則除專著外，一般量子力學的書於此皆不作深入的敘述，一則此二部門，乃作者早年致力所在，寫來較感勝任也。

一本教科書，甚或參考書，和研究論文不同處，是其重點在敘述的條理，課題的選擇，而不必要求其有創新的貢獻。然如其祇作人云亦云而毫無鑑別性的敘述，則大不可。茲以氦原子徑 r 函數的指數方程式的兩根 $+1$ 與 -1 一點為例。五十年來，幾乎所有量子力學的書，輾轉抄襲，皆作同一錯誤。（見第四章第 5 節 (IV-104) 式的下文）。這樣的情形雖是很罕見，但仍是不應有的。作者於本書中儘可能的避免錯誤；為有助於讀者得深刻的印象或瞭解，不惜先後重複的申述某些點。於目錄之後，列舉一些參考文獻外，正文中亦偶列舉參考論文，為有興趣的讀者作進一步研討的參考。

關於參考書籍，每章祇列與本文有密切關係的一二書，蓋除非每書皆作較詳介紹，羅列許多書，徒使讀者有不知所從之感而已。如讀者的興趣，不止於量子力學的“技術”而願知其發展的歷程，則 M. Jammer 氏的 *The Conceptual Development of Quantum Mechanics* 一書，是極佳之作。Dirac 氏的 *The Principles of Quantum Mechanics*，以嚴謹的寫法，建立量子

力學的數學結構，或可視為聖典，但初讀或不易，本書第五章或能有助。

本書第七冊“量子力學”的乙部，將述量子力學 Dirac 的相對論電子方程式及其應用，量子力學的多體系統，古典場論，場的量子化，旋量和一些群論等。

作者開始習量子力學，係在1928年南開大學四年級時，自行試讀 Heisenberg, Born 等的矩陣力學文章，不甚瞭解。後1931-2年，聽 Goudsmit, Uhlenbeck, Heisenberg 的授課及講演，漸得門徑。真正的瞭解，係由 1934 年在國立北京大學授量子力學時始。

本冊的初稿，係在 1956 年秋冬作者在臺灣大學和清華大學（復校第一年）所印發的講義（英文的）。該講義乃基於作者自國立北京大學始，抗戰期中在昆明西南聯合大學，後在美國紐約大學，哥倫比亞大學講授的筆記而成的。該講義所印無多，而竟有流傳美國友人及大學者。茲作若干補充及課題次序的改訂。希望其不僅為一本“中文的量子力學”，而是一本“量子力學”。

吳大猷

1978 年 8 月 於臺北

參考文獻

第一章

W. Heisenberg: The Physical Principles of Quantum Mechanics, Chicago Univ. Press. (1930)

M. Jammer: The Conceptual Development of Quantum Mechanics, McGraw Hill, (1966)

第二章

W. Heisenberg, 見上

M. Jammer, 見上

第三章

M. Born: Atomic Physics

M. Jammer: 見上

第四章

W. Heisenberg, 見上

R. Courant 與 D.Hilbert: Methoden der Math. Physik,
第一版第 6 章第 3 節 (關於 Sturm-Liouville 問題)

H. Bethe 與 E. E. Salpeter: Quantum Mechanics of
One-and Two-Electron Atoms , 關於氫原子

第五章

P. A. M. Dirac: The Principles of Quantum Mechanics

本册第五章的大部分，可視為 Dirac 書首三十節的提要和詮釋。

第六章

E. U. Condon 與 G. H. Shortley: The Theory of Atomic Spectra (關於 Stark 效應)

吳大猷: Vibrational Spectra and Structure of Polyatomic Molecules (關於 Raman 效應)

吳大猷與大村充 (T. Y. Wu and T. Ohmura): The Quantum Theory of Scattering (關於散射問題的積分方程式)

第七章

吳大猷與大村充: 全上 (關於第七章第 4, 5, 6 各節)

第八章

E. U. Condon 與 G. H. Shortley, 全上

第九章

Condon 與 Shortley, 全上

Bethe 與 Salpeter, 見第四章下

第十章

Condon 與 Shortley, 全上

第十一章

L. Pauling 與 E. B. Wilson, Jr.: Introduction to Quantum Mechanics

第十二，十三章

吳大猷，見前第六章，Vibrational ……

目錄

第一章 矩陣力學之基本概念.....	1
1. 量子力學發展的背景.....	1
2. Heisenberg 理論的出發點	3
3. 矩陣代數.....	9
4. 矩陣微積分.....	20
5. 矩陣力學.....	25
6. 變換理論——變換矩陣與機率.....	29
習題.....	31
第二章 矩陣力學.....	35
1. 角動量矩陣.....	35
2. 簡諧振盪.....	42
3. 微擾理論——非簡併系統.....	44
非簡諧振盪.....	47
習題.....	50
第三章 波動力學：L. de Broglie 及 E. Schrödinger 之基本概念	
1. L. de Broglie 的理論.....	53
2. E. Schrödinger 的理論.....	57
3. Schrödinger 波動力學的特性.....	63