

量子力学

文焕邦 刘敬乾

四川科学技术出版社

1986年·成都

内 容 简 介

本书系统讲述量子力学的基本原理，常用近似方法和在一些重要问题上的应用。全书共分九章，第一章和第三章集中讨论量子力学基本原理、物理内容与数学形式，其余各章着重介绍量子力学的方法和应用，以及对论波动方程。它对量子力学教材的传统内容有所改革，在体系和风格上颇具特色。

本书可作综合大学、师范学院物理专业与工科院校相近专业的试用教材，也可供有关教师和科技工作者参考。

序 言

二十世纪初，物理学经历了一场巨大的变革。随着相对论和量子力学的建立，整个物理学被划分为经典物理学和近代物理学。

经典物理学的主要内容有：1）经典力学（包括声学），研究物体机械运动的规律；2）经典电磁学（包括光学），研究电磁现象的规律；3）热力学和经典统计物理学，研究热现象和由大量客体组成的系统中随机运动的统计规律。近代物理学以相对论和量子力学为其主要理论支柱，在此基础上，发展和建立起来了天体、凝聚态、原子分子、原子核和基本粒子物理学，等等。

经典物理学从十六世纪开始研究，经过数百年的持续发展，到十九世纪末，它的各个分支都建立起了系统的理论，并在应用中取得了许多重要的成就。然而，经典物理学理论能够说明和处理的物理问题则是有一定限度的。由于经典物理学研究的对象是宏观物体——实物和辐射场，其中实物的运动速度通常远小于光速；并且经典物理学所给出的各种规律，是宏观物体作为整体的物理规律，它们与组成宏观物体内部结构的个别分子、原子或光子的真实运动没有直接关系。因此，经典物理学理论只能说明和处理一般速度（远小于光速）、宏观范围（远大于原子尺度）内的某些物理问题。

十九世纪末，生产实践和科学实验蓬勃发展。就在这个世纪最后一、二十年里，出人意料地陆续发现了若干新奇的物理现

象，如阴极射线、伦琴射线和天然放射性，等等。这样一来，物理学研究的对象和范围，遂由一般速度扩展至光速，由人类感官所能观察的宏观世界深入到分子、原子等微观世界。为了适应生产和科学发展的需要，相对论和量子力学终于在二十世纪初期相继诞生。

应该着重指出，相对论和量子力学的建立，不仅扩大了物理学研究范围，尤其重要的是，它带来了整个物理学思想的一场巨大变革。这表现在：一方面，相对论和量子力学关于时空、物质和运动等许多自然概念，相对于经典物理学的概念有了极其深刻的变化；另一方面，由研究高速物体的运动而建立起来的相对论的基本概念和理论，与由研究微观粒子的运动而建立起来的量子力学的基本概念和理论，它们之间的结合，迄今犹未最后完成。

量子力学建立初期，它有两种不同的数学表述：海森伯的矩阵力学（1925）和薛定格的波动力学（1926）。不久，薛定格证明矩阵力学和波动力学完全等价，即这两种不同的数学表述反映了同一种力学规律。接着，玻恩对波函数提出了正确的统计解释，狄拉克对电磁场的量子理论作了补充，非相对论量子力学至此达到基本完善。1927年以后，相对论量子力学，量子统计力学，量子电动力学和量子场论纷纷出现。直到目前，经过近六十年的发展，整个量子理论已经具有非常丰富的内容。

量子力学是研究微观粒子运动规律的基本理论。诚然，量子力学研究的对象是微观粒子（分子、原子、原子核和其它基本粒子），它的主要任务是研究微观粒子的运动规律。但是，量子力学以及各种量子理论，其适用范围则不局限于微观体系。凡是需

要考虑量子效应的一切物理体系，无论它是微观体系还是宏观体系，都需要应用量子理论。例如，原子的结构和性质，原子核的组成、反应和衰变，基本粒子的产生与湮灭等等，研究这一类微观体系的问题需要量子理论。又如，固体的结构和性质，某些物质在低温下的超导与超流现象，木星和土星上绝大部分氢呈现为金属态，以及生物界中某些基本生命过程等等，研究这一类宏观体系的问题也需要量子理论。可见，量子力学和其它量子理论，已经成为当代科学技术最重要的理论基础之一。

本书系统讲述量子力学的基本原理，常用近似方法和在一些重要问题上的应用。全书共分九章，第一章和第三章集中讨论量子力学基本原理的物理内容与数学形式，其余各章着重介绍量子力学的方法和应用，以及相对论波动方程。各章均附有习题。比较次要的内容采用小体字排印。

本书是根据我们在四川大学和成都大学编写与使用的量子力学讲义修改而成的。书稿经过冯志超教授、黄昌运教授、刘绍伯、谢伯儒和谢汉德副教授等认真审阅，对以上各位及所有曾为本书的写作与出版给予各种支持的老师和同志，我们在此一并表示深切的谢意。因囿于学识，书中错误在所难免，希望读者不吝指正。

文焕邦 刘敬乾

1985. 8. 于成都

目 录

想

出

序言

第一章 基本概念和基本原理

§ 1.1	波与粒子	1
	电磁波与光子	
	实物粒子与物质波	
§ 1.2	波动与粒子二象性	6
	双缝干涉实验	
	波粒二象性	
§ 1.3	波函数	12
	波函数的统计解释	
	状态叠加原理	
§ 1.4	平面波与波包	17
	平面波的相速度和归一化	
	波包的群速度和波包扩张	
§ 1.5	薛定格方程式	26
	含时薛定格方程	
	定态薛定格方程	
§ 1.6	力学量与算符	35
	力学量的算符表示	
	厄密算符的本征值和本征函数	
§ 1.7	力学量的统计分布与不确定关系	52
	力学量的统计分布	

力学量具有确定值的条件

不确定关系

习题69

第二章 一维定态问题

§ 2.1 定态问题的简化与分类72

一维与三维问题的关系

一维方形势场的概念

定态问题的分类

§ 2.2 一维方势阱中粒子的运动77

一维无限深势阱

一维有限深势阱

§ 2.3 势垒贯穿、势垒和势阱的散射85

势垒贯穿

势垒和势阱的散射

§ 2.4 一维晶格中电子的运动93

波函数的一般形式

晶体中电子的能带

晶体的导电性质

§ 2.5 一维谐振子102

谐振子的经典描述

定态方程的级数解

能级与波函数

§ 2.6 准经典近似法111

准经典近似波函数

近似波函数的连接公式

准经典近似法的应用

习题126

第三章 表象理论

§ 3.1 态和力学量的表示129

分立谱的表象

	连续谱的表象	
§ 3.2	狄拉克符号	140
	态矢量空间的定义与性质	
	线性算符与共轭规则	
§ 3.3	量子力学公式的表示	148
	标积公式	
	平均值公式	
	本征方程式	
	薛定格方程式	
	密度算符和密度矩阵	
§ 3.4	线性谐振子与占有数表象	162
	基本算符 $\hat{a}$ 和 $\hat{a}^+$	
	$\hat{H}$ 的本征值与本征函数	
	占有数表象	
§ 3.5	表象变换	172
	态和力学量的表象变换	
	表象变换的性质	
	么正算符	
§ 3.6	运动图象	181
	运动图象与运动方程	
	运动方程的经典类比	
§ 3.7	对称性与守恒定律	192
	时间均匀性与能量守恒	
	空间均匀性与动量守恒	
	空间各向同性与角动量守恒	
	空间反射对称性和宇称守恒	
	习题	205
第四章	角动量与自旋	
§ 4.1	角动量的一般性质	208
	角动量的基本定义与 $\hat{J}_{\pm}$ 算符	

$\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 算符的本征值

$\hat{J}^2$ 和 $\hat{J}_z$ 为对角的表象

§ 4.2 轨道角动量与球谐函数.....216

轨道角动量的算符与本征值

球谐函数与勒让德多项式

§ 4.3 两个角动量的耦合.....228

总角动量的本征值与本征矢

矢量耦合系数的计算

§ 4.4 电子自旋的引入和描述.....239

实验事实与自旋假设

自旋算符和自旋函数

考虑自旋时电子运动的非相对论描述

§ 4.5 在磁场作用下自旋态的运动.....250

均匀恒定磁场中电子的磁能级和状态

拉摩进动

磁共振现象

§ 4.6 一般二能级体系.....264

一般二能级体系与假想自旋

在微扰作用下体系的能级和状态

两个非微扰状态之间的谐振

氮分子

习题.....280

第五章 中心场中的运动

§ 5.1 中心场中粒子运动的一般性质.....285

球极坐标系与变量分离

中心场中运动的一般性质

§ 5.2 球方势阱中的运动.....293

无限深球方势阱

有限深球方势阱

§ 5.3	三维各向同性谐振子.....	303
	径向方程的解	
	能级与波函数	
§ 5.4	氢原子.....	313
	质心运动与相对运动	
	径向方程的解	
	能级与波函数	
	原子中的电流和轨道磁矩	
§ 5.5	在磁场中的原子.....	328
	原子在磁场中的哈密顿量	
	正常塞曼效应	
§ 5.6	分子的振动和转动.....	334
	电子运动与原子核运动的分离	
	双原子分子的振动和转动	
	习题.....	342
第六章 束缚态的近似方法		
§ 6.1	定态微扰法.....	345
	各级近似方程	
	非简并微扰法	
	简并微扰法	
§ 6.2	定态微扰法的应用.....	363
	电介质的极化	
	范德瓦尔斯力	
	氢原子的斯塔克效应	
	反常塞曼效应	
§ 6.3	变分法.....	380
	变分原理及其引理	
	直接变分法与线性变分法	
§ 6.4	变分法的应用.....	387
	基态氦原子	

游离氢分子

§ 6.5	含时微扰法	400
-------	-------	-----

近似波函数与跃迁几率

含时微扰与定态微扰的关系

常微扰与周期微扰

§ 6.6	光的发射与吸收	412
-------	---------	-----

爱因斯坦的发射、吸收系数

受激跃迁几率的计算

偶极跃迁的选择定则

习题		420
----	--	-----

第七章 散射态的近似方法

§ 7.1	散射过程的一般描述	423
-------	-----------	-----

散射截面与散射振幅

质心坐标系与实验室坐标系

§ 7.2	中心场中的弹性散射、分波法	433
-------	---------------	-----

径向方程的渐近解

散射振幅与散射截面

分波法的适用范围

相移的积分表示

§ 7.3	低能弹性散射	444
-------	--------	-----

球方势阱和势垒的散射

形状无关近似

§ 7.4	格林函数法与玻恩近似	450
-------	------------	-----

格林函数法与符号表示

玻恩近似与跃迁几率

§ 7.5	非弹性散射的一般理论	462
-------	------------	-----

散射微分方程的积分解

散射振幅与散射截面

§ 7.6	原子对电子的散射	468
-------	----------	-----

非弹性散射截面

高能电子的弹性散射

习题	473
----------	-----

第八章 多粒子体系

§ 8.1 全同粒子体系的一般描述	474
全同粒子的特性、玻色子与费米子	
全同粒子体系的波函数、泡利原理	
§ 8.2 全同粒子的散射	484
零自旋全同粒子的散射	
非零自旋全同粒子的散射	
§ 8.3 氮原子和氢分子	493
氮原子的能级与波函数、仲氮和正氮	
氢分子的能级与波函数、化学键	
§ 8.4 金属中的自由电子气	508
电子气的基态、费米能与态密度	
费米能附近的电子性质、热容与磁化率	
§ 8.5 自治场法与统计近似	518
哈特利—福克自治场法	
托马斯—费米统计近似	
§ 8.6 二次量子化	533
玻色子体系的二次量子化	
费米子体系的二次量子化	
二次量子化的物理含义、场算符	

习题	552
----------	-----

第九章 相对论波动方程

§ 9.1 克莱因—戈登方程	554
克莱因—戈登方程	
π 介子场方程	
§ 9.2 自由粒子的狄拉克方程	560
狄拉克方程的引入	
α 和 β 算符的矩阵表示	

	几率守恒	
	自旋角动量	
§ 9.3	自由粒子狄拉克方程的解	569
	平面波解	
	负能量状态	
§ 9.4	电磁场中的狄拉克方程	575
	狄拉克方程与泡利方程	
	自旋磁矩与轨道自旋相互作用	
	氢原子的非相对论近似能级	
§ 9.5	中心场中的狄拉克方程	585
	中心场中的守恒量	
	球极坐标系中的径向方程	
§ 9.6	库仑场中狄拉克方程的解	590
	径向方程的级数解	
	氢原子光谱的精细结构	
习题		597

第一章 基本概念和基本原理

§ 1.1 波与粒子

需要谈谈量子力学建立前期，人们对光和实物的基本认识。

一、电磁波与光子

(一) 光的经典理论 牛顿(*Newton*)提倡光的粒子说，认为光是由粒子组成的。例如，射向镜面的光，会象粒子那样反弹回来。到了十九世纪中叶，光的波动说得到干涉、衍射现象的直接证实，以后又为麦克斯威(*Maxwell*)电磁理论(1864)所证明。在电磁理论中，光即是电磁波，光速 c 作为一个电磁常数，光的偏振能够用电场强度的矢量性质来说明。

(二) 普朗克假设 但是，涉及到光与物质在原子范围内相互作用的黑体辐射问题，用光的电磁理论就不能正确解释。为此，普朗克(*Planck*)被迫提出能量量子假设(1900)：如将黑体视为由若干带电振子组成，其中频率为 ν 的振子，只能以 $h\nu$ 为单位不连续地发射和吸收辐射能量。不连续性即是量子化，单位能量 $h\nu$ 称为量子。 h 叫做普朗克常数，它作为一切量子效应的重要标志，是物理学基本常数之一。普朗克采用能量量子概念，成功地解释了黑体辐射问题。

按照普朗克假设，既然黑体只能不连续地发射和吸收能量，那么，在热平衡下由黑体辐射所建立起来的辐射场中，对于频率为 ν 的电磁辐射，其允许能量也就只能是

$$\underline{E_n = nh\nu} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (1.1-1)$$

这个结论可推广到所有的辐射场。^{*} 于是，普朗克肯定了辐射场允许能量数值是不连续的；但未肯定辐射场内部结构也是不连续的，即未明确提出光量子的概念。

(三) 爱因斯坦假设 爱因斯坦(Einstein)进一步提出光子量子假设(1905)：光(辐射场)是由光子组成的，频率为 ν 的光中，每一个光子具有 $h\nu$ 的能量。光子简称光子。光子的静止质量为零，但它能够象普通粒子那样具有能量和动量。根据狭义相对论给出的光子动量与能量的关系 $p = E/c$ ，加上普朗克关系 $E = h\nu$ ，爱因斯坦得出了光子的能量 E 和动量 p ，与光波的频率 ν 和波长 λ 所满足的基本关系

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ p = \frac{h}{\lambda} p_0 = \hbar k \end{cases} \quad (1.1-2)$$

这就是普朗克—爱因斯坦公式。其中， $\omega = 2\pi\nu$ 为角频率， k 为波矢，它的数值 $k = 2\pi/\lambda$ 称为波数，方向与动量方向 p_0 一致。普朗克常数 $h = 6.626 \times 10^{-34} J \cdot S$ ，常数 $\hbar = h/2\pi$ 。

按照光子假设，爱因斯坦用一个很简单的公式，便成功地解释了光电效应，使光子的概念成为可理解的。但是，光子的真实存在，则是在十多年后通过康普顿(Compton)效应(1922)的证实，才为人们所普遍接受。

至此，可以得出如下结论：

1) 光在干涉、衍射现象中表现出波动性，在与物质相互作用的过程中表现出粒子性，因而光具有波动性和粒子性；

2) 光的能量和结构是不连续的，光与物质的相互作用过程(发射、吸收和散射)也是不连续的，它以一种不可分的元过程的形式而发生。在元过程中，总能量和总动量保持守恒。

^{*} 经典的辐射场，是指脱离了场源而运动的电磁波。

二、实物粒子* 与物质波

(一) 玻尔假设 在一定条件下,原子能够发射或吸收光。实验表明,原子光谱是由一些很窄的不连续的谱线组成。这就是说,一定的原子只能发射或吸收某些确定频率的光。经典物理学不能解释这个与原子内部过程有关的实验事实。为此,玻尔(N. Bohr)提出关于原子的量子假设(1913):原子能够稳定地处于具有不连续能量的一系列定态;如果原子由能级 E_n 的定态跃迁到 E_m 的定态,依照元过程中能量守恒,原子在跃迁过程中发射或吸收频率为

$$\nu = \frac{E_m - E_n}{h} \quad (m, n = 1, 2, \dots) \quad (1.1-3)$$

的光。利用上式,玻尔成功地解释了氢原子光谱的频谱结构。同时,玻尔和索末菲(Sommerfeld)提出了量子化条件

$$\oint p dq = nh \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.1-4)$$

其中 q 和 p 代表原子中电子的广义坐标和广义动量。在圆轨道的情形下,(1.1-4)式变为

$$rp = n\hbar \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.1-5)$$

由轨道方程和量子化条件,就能算出氢原子中电子的各种可能轨道和相应的定态能量。但是,关于量子化条件中整数 n 的来源,则似乎带有某些神秘的色彩。

(二) 德布洛依假设 如果说光的电磁理论不能解释黑体辐射,是由于它完全忽视了光的粒子性。那么,玻尔理论的神秘色彩,是不是因为它完全忽视了实物粒子的波动性呢?

德布洛依(de Broglie)试图将实物粒子与光的理论统一起来,提出了关于物质波的假设(1924):实物粒子和光子一样能

* 指静止质量不为零的粒子,如分子、原子、质子和电子等等。

够具有波动性，一切实物粒子都与它的物质波相联系。正如光子和光波的关系 (1.1-2) 式那样，德布洛依将实物粒子与物质波通过基本关系

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ \mathbf{p} = \frac{h}{\lambda}\mathbf{p}_0 = \hbar\mathbf{k} \end{cases} \quad (1.1-6)$$

联系起来。其中 E 和 $\mathbf{p}$ 代表粒子的能量和动量， ν 和 λ 代表物质波的频率和波长。(1.1-6) 式称为德布洛依公式。物质波的波长

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (1.1-7)$$

直接与粒子的动量 p 相联系。显然，必须是具有确定动量的粒子，才能具有确定的波长。

德布洛依曾经设想，原子中具有各种允许能级，可能类似于弦振动具有各种简正模式。于是，他将处在定态的原子与某种物质驻波等同起来。在圆轨道情形下，如图1-1所示，稳定驻波必须满足约束条件

$$2\pi r = n\lambda$$

图 1-1

再将德布洛依关系 $\lambda = h/p$ 代入，得

$$rp = n\hbar \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.1-8)$$

这就是玻尔理论中的量子化条件，它能由德布洛依假设很自然地导出。

德布洛依曾将物质波与电磁波作比较。在电磁理论中，电磁波被视为具有能量和动量的物质实体，凡电磁波存在的地方，就会有能量和动量在空间连续分布。因此，德布洛依认为，凡物质波存在的地方，也必有能量和动量在空间连续分布。按照德布洛

