高等学校
工科电子类 规划教材

理论物理导论

李卫 刘义荣

北京理工大学出版社

理论物理导论

李 卫 刘义荣

北京理工大学出版社

（京）新登字 149 号

内 容 简 介

本书简明扼要地介绍理论物理方面的基础知识（不含电磁场理论）。内容由五部分组成：分析力学、量子力学、热力学、统计物理学和固体物理学的主要内容（晶格振动、格波与能带论基础——周期场中的电子）。除了着重概念阐述，以使工科学生易学易懂以外，在教材内容的处理上进行了一些尝试，以节省篇幅和学时。

本书为高等学校工科电子类微电子技术专业教材，亦可供电子元件与材料专业、激光专业等相近专业使用及有关工程技术人员参考。

理论物理导论
李 卫 刘义荣
*
北京理工大学出版社出版发行
各地新华书店经售
北京市万龙图文信息公司排版
永清县印刷厂印刷
*
850×1168 毫米 32 开本 15.875 印张 397 千字
1994 年 7 月第一版 1994 年 7 月第一次印刷
ISBN 7－81013－261－X/O・51
印数：1—2500 册 定价：12.50 元

前　言

本教材系按中国电子工业总公司的工科电子类专业教材1991—1995年编审出版规划，由"电子材料与固体器件"教材编审委员会"半导体物理与器件"编审小组征稿推荐出版。责任编委为曹培栋。

本教材由北京理工大学刘义荣、李卫合编，西安交通大学刘秉钧担任主审。

本课程的参考学时数为72学时，其主要内容为量子力学、热力学与统计物理，另有一章经典力学简介。编写的目的是为把量子力学、热力学与统计物理两门课程合并为一门后，提供一份适用的教材，希望既能为后续课程提供足够的物理基础知识，又能节省一部分学时。为了使初学者认识到物理基础的重要作用，在选材时，有意将对于后续课程有重要意义的固体物理内容，如能带论、晶格振动等，作为物理基础理论的应用溶入教材之中，想在保持物理学本身的系统性的前提下，尽可能地向学生展示它的应用。对于工科中需要物理基础较多，所谓"偏理"专业来源，学完本教材之后，不经学习"固体物理"这门课，直接接触专业课应已无很大困难。使用本教材时注意，凡标题上加 * 号者均为选学内容，课堂讲授与否由教师掌握。有几章后面有附录，一部分是为学生学习时参考方便而设，如属复习性质的全微分与线积分、排列组合等；另一部分是估计到初学者并无足够的背景知识，阅读难免有困难而写入的。这主要是一些数学推导。这一部分附录材料在性质上也属于选学内容，也应由教师掌握是否在课堂上介绍，但学生在自学时希望教师能给予指导。

本教材由刘义荣编写量子力学部分，李卫编写经典力学简介及热力学，统计物理部分，最后共同协商统一全部书稿。参加审阅工作的还有华中理工大学的马稚尧同志，他们都为本书提供出许多宝贵意见，这里表示诚挚的感谢。由于编者水平有限，书中难免还存在一些缺点和错误，殷切失望广大读者批评指正。

编　者

1994 年 4 月

目　录

第一章 经典力学简介

所谓经典力学，即是牛顿力学，这是一门最古老的科学，它的创建要归功于伽利略(Galileo Galilei 1564—1642)、惠更斯(C. Huygens 1629—1695)及牛顿(I. Newton 1643—1727)等人。1687年在伦敦出版了牛顿的著作《自然哲学的数学原理》，牛顿系统地阐述了他的统一而和谐的理论，他的基本观点在此后二百多年里一直在物理学中占统治地位，直到相对论和量子理论问世，才给它一次根本性的冲击。尽管如此，现在当我们研究、分析宏观物体的运动时，牛顿力学仍旧是有力的工具，何况，在科学中没有无源之流，即使在量子力学中，我们也不能完全割断它与牛顿力学的联系，这正是我们今天还要学习它的原因。

提起牛顿力学，我们马上会想到著名的牛顿三定律，这在中学以及大学的普通物理课程中都已经介绍过了。现在我们要简要介绍的是继牛顿之后的一个多世纪里，在牛顿所创建的原理的基础之上，经过诸如拉格朗日(J. L. Lagrange 1736—1813)、哈密顿(W. R. Hamilton 1805—1865)等人的努力所建立起来的“分析力学”体系。分析力学这个名称就是从拉格朗日的著作的标题：Mechanique Analytique 来的。

§1-1 自由度·约束与广义坐标

为了确定一个质点(在描述其运动时，可以忽略其大小，当作一个“点”来处理的物体)在空间的位置，常需要三个坐标 x、y、z。假如质点是完全自由的，即 x、y、z 彼此独立，则可称该质点有三

个自由度。但在某些情况下，例如限制质点在某一特定的轨道上运动，则 x、y、z 三变量之间存在着一定的关系，即 x、y、z 三变量并非彼此独立。例如，限制质点在平面上运动，由一般的平面方程 $Ax+By+Cz+D=0$，可见确定质点位置的 x、y、z 已不可能彼此无关，独立地选定 x、y，则 z 就确定了，所以该质点的自由度只剩下两个了，该平面方程即称为“约束方程”。如果设想限制该质点只在一条直线上运动，且这条直线为两个平面的交线，即此直线由 $A_1x+B_1y+C_1z+D_1=0$ 及 $A_2x+B_2y+C_2z+D_2=0$ 联立确定，则约束方程现在是两个，可供独立选择的坐标变量只余一个，该质点的自由度即为 1。一般说来，由 N 个质点组成的系统，如果各个质点彼此无影响，每个质点均不受任何约束，则此系统 由 $3N$ 个独立坐标来描述，如果有形式为 $f_i(x_1, y_1, z_1, \cdots, x_{3N}, y_{3N}, z_{3N})=0$ $(i=1, 2, \cdots, k)$ 的 k 个约束方程，则此系统只需 $3N-k$ 个独立坐标来描述，称此系统具有 $3N-k$ 个自由度。为单值地确定一个系统的位置所必需给定的独立变量的数目，叫作这个系统的自由度数。这些独立量不一定非是笛卡儿直角坐标不可，根据问题的条件，有时选择某一种其他的坐标可能更合适。如研究单摆，用摆球偏离铅直方向的角度 θ 来表示摆球的位置就足够了，又如研究除彼此间相互吸引的作用外，无其他作用力的二质点系统的运动，利用球面坐标更方便(后面有具体讨论)。所以，为了方便，用足够描述有 s 个自由度的系统的位置的 s 个量记以 $q_1, q_2, q_3, \cdots, q_s$，称为该系统的 s 个广义坐标，广义坐标 q 对时间的微商，$\mathrm{d}q/\mathrm{d}t$，记以 $\dot{q}$，称为广义速度。以后我们即采用这种规定，在量的符号 x 上方加一个点，$\dot{x}$，代表 x 对 t 的一次导数，加两个点，$\ddot{x}$，代表 x 对 t 的二次导数。

§1-2 拉格朗日方程

在牛顿运动定律中，出现的量是力、速度、加速度等带有方向

的量，而拉格朗日所建立的方程式，引用广义坐标，以力学系统的动能和势能作为基本量来分析问题，其优越性在处理受约束的力学系统的问题时，特别明显。因为用拉格朗日方程来分析问题时，只需要与系统的自由度数一样多的方程式就够了。为了介绍上的方便，我们先用直角坐标从牛顿运动方程导出拉格朗日方程(以下简称拉氏方程)的形式，然后再过渡到用广义坐标表示的形式。

1. 用拉格朗日函数表示牛顿运动方程

设第 i 个质点的三个直角坐标为 x_i、y_i、z_i，质量为 m_i，则 N 个质点的牛顿运动方程为

$$m_i\ddot{x}_i = X_i, m_i\ddot{y}_i = Y_i, m_i\ddot{z}_i = Z_i, (i = 1,2,3,\cdots,N) \quad (1\text{-}1)$$

其中 $\ddot{x}_i$、$\ddot{y}_i$、$\ddot{z}_i$ 代表第 i 个质点的加速度在 x、y、z 三个方向上的分量，X_i、Y_i、Z_i 则代表作用于该质点的力的三个分量。对于每一个质点都有类似的方程，所以含有 N 个质点的力学系统应有 $3N$ 个这样的方程。

定义用直角坐标表示的质点动能 T 为

$$T = \frac{1}{2}m_1(\dot{x}_1{}^2 + \dot{y}_1{}^2 + \dot{z}_1{}^2) + \cdots + \frac{1}{2}m_N(\dot{x}_N{}^2 + \dot{y}_N{}^2 + \dot{z}_N{}^2)$$

$$= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N} m_i(\dot{x}_i^2 + \dot{y}_i^2 + \dot{z}_i^2) \quad (1\text{-}2)$$

同时，如果我们讨论的是所谓“保守力系”，则可以引入一个势函数 $U(x,y,z)$ 而有

$$X_i = -\frac{\partial U}{\partial x_i}, Y_i = -\frac{\partial U}{\partial y_i}, Z_i = -\frac{\partial U}{\partial z_i}, \quad (i = 1,2,3,\cdots,N)$$

$$(1\text{-}3)$$

从静电场中电场强度等于静电势的梯度的负值有助于想象这种关

系的存在。

由(1-2)式不难得到

$$\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i} = \frac{1}{2}m_i \times 2\dot{x}_i = m_i\dot{x}_i$$

由此可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}\right) = \frac{\mathrm{d}(m_i\dot{x}_i)}{\mathrm{d}t} = m_i\frac{\mathrm{d}\dot{x}_i}{\mathrm{d}t} = m_i\ddot{x}_i$$

由(1-1)式，$m_i\ddot{x}_i$ 正是 X_i，于是

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i}\right) = X_i$$

再结合(1-3)式，可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{x}_i} + \frac{\partial U}{\partial x_i} = 0 \tag{1-4}$$

同样可以写出其余两个分量的式子

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{y}_i} + \frac{\partial U}{\partial y_i} = 0 \tag{1-4$'$}$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial T}{\partial \dot{z}_i} + \frac{\partial U}{\partial z_i} = 0 \tag{1-4$''$}$$

现在引入拉格朗日函数(以下简称拉氏函数)L，定义为

$$\begin{aligned} L &= L(x_1, y_1, z_1, \cdots, x_N, y_N, z_N, \dot{x}_1, \dot{y}_1, \dot{z}_1, \cdots, \dot{x}_N, \dot{y}_N, \dot{z}_N) \\ &= T - U \end{aligned} \tag{1-5}$$

由于动能 T 只是速度 $\dot{x}_1, \cdots, \dot{z}_N$ 的函数，而 U 又限于只是坐标 x_1，$\cdots, z_N$ 的函数，因此在引入 L 后，式(1-4)、(1-4)$'$、(1-4)$''$可以写成

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{y}_i} - \frac{\partial L}{\partial y_i} = 0, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{z}_i} - \frac{\partial L}{\partial z_i} = 0$$

$$(i=1,2,\cdots,N) \tag{1-6}$$

(1-6)式,即牛顿运动定律用拉氏函数表示的形式。下面即将论证,把直角坐标 x、y、z 以及 $\dot{x}$、$\dot{y}$、$\dot{z}$ 变换成广义坐标 $q_1,q_2,\cdots,q_i,\cdots$ 以及 $\dot{q}_1,\dot{q}_2,\cdots,\dot{q}_i,\cdots$,对于一个保守力系,(1-6)式形式不变。

2. 拉格朗日方程

假如有一个由 N 个质点组成的质点系,具有 s 个自由度,可由 s 个广义坐标确定其位置,一般说来,在每个质点的三个直角坐标与 s 个广义坐标之间存在着联系,这种联系称为"变换方程",如

$$x_i = x_i(q_1,q_2,\cdots,q_s),\ y_i = y_i(q_1,q_2,\cdots,q_s)$$

$$z_i = z_i(q_1,q_2,\cdots,q_s),\ (i=1,2,\cdots,N) \tag{1-7}$$

坐标 x_i、y_i、z_i 决定一个位置矢量 $\boldsymbol{r}_i$,于是有

$$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_i[q_1(t),q_2(t),\cdots,q_s(t)],\ (i=1,2,\cdots,N)^{①} \tag{1-8}$$

将牛顿运动定律(1-1)写成矢量形式

$$m_i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right) = \boldsymbol{F}_i,\ (i=1,2,\cdots,N) \tag{1-9}$$

$\boldsymbol{F}_i$ 的三个分量即 X_i,Y_i,Z_i,将(1-9)矢量式两边同取与 $\partial\boldsymbol{r}_i/\partial q_j$ 的内积,并对全部质点求和,得

$$\sum_{i=1}^{N} m_i\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t}\right)\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j} = \sum_{i=1}^{N}\boldsymbol{F}_i\cdot\frac{\partial\boldsymbol{r}_i}{\partial q_j},\ (j=1,\cdots,s) \tag{1-10}$$

上式的右方可视为广义力。为将(1-10)写成更为简洁的形式,利用

---

① 此处 $\boldsymbol{r}$ 是通过 q 以隐函数的形式与时间 t 有关,如果遇到所谓"非定常约束",即约束条件本身就是时间的显函数的情形,例如一个带孔小珠在一本身就在运动中的线上滑动,则 $\boldsymbol{r}$ 应写为 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}[q_1(t),q_2(t),\cdots,q_s(t),t]$,对此不再进行讨论。

求积的导数的法则

$$\dot{U}V = (\dot{U}V) - U\dot{V}$$

则(1-10)式的左方为

$$\sum_{i=1}^{N} m_i \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_j} \right) - \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_j} \right) \right] \tag{1-11}$$

其中两项可以改写如下：

(1)由于

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_i}{\mathrm{d}t} = \dot{\boldsymbol{r}}_i = \sum_{k=1}^{S} \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}t} = \sum_{k=1}^{S} \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \dot{q}_k$$

再将 $\dot{\boldsymbol{r}}_i$ 对广义速度 $\dot{q}_j$ 求偏导数

$$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_j} = \sum_{j=1}^{S} \frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial \dot{q}_j}$$

由于选定各 q 是彼此独立的，所以 $\partial\dot{q}_k/\partial\dot{q}_j$ 形式的项只有在 $k=j$ 时等于 1，其余 $k \neq j$ 时均等于零，所以

$$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial \dot{q}_j} = \frac{\partial r_i}{\partial q_j} \tag{1-12}$$

(2)我们还可以导出

$$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_k} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \right) \tag{1-13}$$

因为 $$\frac{\partial \dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_k} = \sum_{j=1}^{S} \frac{\partial}{\partial q_k}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_j} \right) \dot{q}_j = \sum_{j=1}^{S} \frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \right) \dot{q}_j$$

其中利用了将 $\boldsymbol{r}_i$ 对 q_k、q_j 依次求导与次序无关，又因为

$$\sum_{j=1}^{s} \frac{\partial}{\partial q_j}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \right) \dot{q}_j = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\frac{\partial \boldsymbol{r}_i}{\partial q_k} \right)$$

故(1-13)得证，此式表明运算 d/dt 与 $\partial/\partial q_k$ 可以交换，由(1-12)及(1-13)两式，则(1-11)可以写成

$$\sum_{i=1}^{N} m_i\left[\frac{d}{dt}\left(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\frac{\partial\dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial\dot{q}_j}\right)-\dot{\boldsymbol{r}}_i\left(\frac{\partial\dot{\boldsymbol{r}}_i}{\partial q_j}\right)\right]$$

$$=\sum_{i=1}^{N} m_i\left[\frac{d}{dt}\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\dot{q}_j}(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i)-\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial q_j}(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i)\right]$$

$$=\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\dot{q}_j}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}m_i(\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i)\right)-\frac{\partial}{\partial q_j}\left(\sum_{i=1}^{N}\frac{1}{2}m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i\right)$$

$$=\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\dot{q}_j}T-\frac{\partial}{\partial q_j}T \tag{1-14}$$

其中 $T=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}m_i\dot{\boldsymbol{r}}_i\cdot\dot{\boldsymbol{r}}_i$ 是系统的总动能，于是(1-10)式成为

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\dot{q}_j}T-\frac{\partial}{\partial q_j}T=Q_j,(j=1,2,\cdots,s) \tag{1-15}$$

式中右方的 Q_j 代表广义力。在导出(1-15)式时，出发点是牛顿运动定律，对于力的性质未加任何假设与限制，所以这 s 个二阶微分方程对于保守力与非保守力都能适用，即对 Q_j 没有任何限制。如果用于保守力系，则可以用势函数 U 的梯度的负值 $-\partial U/\partial q_j$ 来代替广义力 Q_j，于是(1-15)又可以写成

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\dot{q}_j}T-\frac{\partial}{\partial q_j}T=-\frac{\partial U}{\partial q_j}$$

或

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial}{\partial\dot{q}_j}T-\frac{\partial}{\partial q_j}T+\frac{\partial U}{\partial q_j}=0$$

因为 U 不是广义速度 $\dot{q}$ 的函数，所以 $\partial U/\partial\dot{q}_j=0,-\frac{d}{dt}(\partial U/\partial\dot{q}_j)$ 当然也等于零，把此项写入上式，得到