

等量子力学

[美] D. S. 萨克森 著

苏耀中 叶安祚 译

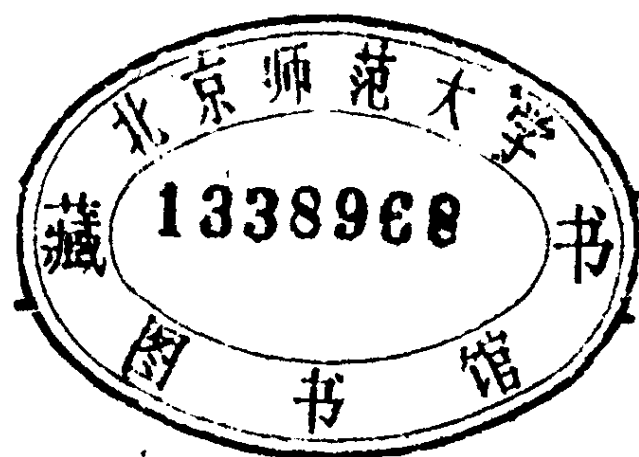


高等教育出版社

初等量子力学

[美] D. S. Saxon 著

苏耀中 叶安祚 译



高等教育出版社

本书根据[美] Holden-Day, Inc. 1968年出版的 D. S. 萨克森(D. S. Saxon)著《初等量子力学》译出。该书系作者在洛杉矶加利福尼亚大学讲授量子力学课程的讲义写成。内容限于讨论非相对论量子力学,有一定的深度和广度。

本书1—5章由叶安祚翻译,其余各章由苏耀中翻译,全书由苏耀中统校。

本书可作为高等院校物理专业及有关专业高年级大学生学习量子力学课程的参考书。

初等量子力学

[美] D. S. Saxon 著

苏耀中 叶安祚 译

9388881

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

顺义永利印刷厂印装

开本 850×1168 1/32 印张 14.75 字数 355,000

1985年11月第1版 1985年11月第1次印刷

印数 00,001—07,200

书号 13010·1004 定价 3.35元

绪 言

本书是根据作者在洛杉矶加利福尼亚大学讲授大学重点课程量子力学的讲义写成的,该课程在物理课中占有重要地位。它是所有攻读物理学和天体物理学学生三年级的必修课,而且也是物理学及有关专业某些高年级学生及许多研究生要学习的课程。

凡学本课程的学生,都要求学过初等哈密顿力学的基本知识,对于简单的体系,要知道什么是哈密顿函数,什么是哈密顿方程。在数学方面,学生还须受过微分方程和傅里叶级数的训练,至少还要理解数学物理中的一些特殊函数。但是,为了力求使数学尽可能简单,本书前三分之二的篇幅主要限于讨论一维体系。

全书的重点是建立量子力学的公式,而不是它的应用。在洛杉矶加利福尼亚大学里,关于量子力学的应用是紧接着在原子物理学,原子核物理学,固体物理学和基本粒子物理学等后继选修课程中讲授的。最后一章就是打算为学习这些应用课程铺平道路的;在那一章里,将简要介绍一些比较高深的课题。

本书涉及的范围颇广,因而不能对每个问题都深入讨论。但是,在只作扼要介绍的地方就给出详细讨论的参考文献。就其他各方面而论,本书均自成体系。初版经验表明,学生对它是可以接受的,并且他们可以主要采用自学方式进行学习。因此,教师在很大的程度上可以很自由地按自己的方式来阐述问题。

书中介绍了一百五十个习题,从教学法的观点来看,它们起着重要的作用。这些习题不仅专门阐述本书所论及的材料,还对本书作了引伸。作者有意编选了许多题目,打算通过指出新论题和新观点的办法,来扩充本课程的范围。许多习题对学生太难,以致于在第一次做练习时还不能掌握它们。随着学生理解力的增长,应鼓励他们一再重新解答这些习题。最后他应能解出所有的习题。附录 III 中给出了约五十个典型习题的答案或完整解。书中各处还穿插着大约四十道练习题。这些练习题大多要进行仔细计算,但并非都是琐碎的。

在洛杉矶加利福尼亚大学里,本书的材料连续在两学季(一年分四学季——译注)内讲完。但是,作者还打算把本书用于一学期的课程;目录中带星号的任何部分或全部章节可以略去不讲,这不会损害逻辑上的进展。相反,如需要将本书用于一学年的课程,那就应作些补充。首先想到的课题就是海森堡表象和相互作用表象,一般变换理论等课题。从应用的角度来看,塞曼效应和斯塔克效应,布洛赫波,哈特里-福克法和费米-汤姆孙法,简单分子和同位旋等,都是一些适合选用的课题。

作者从许多同事和学生那里得到了大量有益的批评和建议。作者对他们每个人都表示深切的谢意。特别要感谢 R. 布卢姆博士,他细心审阅了初版和最后的手稿。对于加进附注,改正印刷错误和其他错误的人,作者也同样深表谢忱。

D. S. 萨克森

1967 年 11 月

“现在就请读者努力吧！尽管我们总会在难懂的地方给你适当的帮助，因为我们不愿象有的作者那样，指望你用占卜技巧来猜测我们的意思；但是，在只需要你自己努力钻研就能理解之处，我们决不会纵容你懒惰。如果你以为在我们开始写这本著作时就想让你的聪明才智无从发挥，或者以为无需经常运用你的这种才干就能纵览全书并获得一些乐趣或教益，那你就完全想错了。”

亨利·菲尔丁

目 录

第一章 物质和辐射的二象性1

1. 经典物理学的失败*1
2. 量子力学的概念3
3. 粒子的波动特性6
4. 数值大小和量子范围13
5. 波的粒子特性14
6. 互补性17
7. 对应原理18

第二章 态函数及其解释20

1. 态函数的概念; 态的迭加20
2. 期待值26
3. 态的量子力学描述和经典力学描述的比较; 波包28

第三章 线性动量32

1. 与确定动量相对应的态函数32
2. 迭加构成的波包34
3. 傅里叶变换; 狄喇克 δ 函数38
4. 动量空间和位形空间42
5. 动量算符和位置算符42
6. 对易关系50
7. 测不准原理52

第四章 自由粒子的运动	62
1. 波包的运动; 群速度	62
2. 对应原理的要求	65
3. 位形空间中自由粒子波包的传播	67
4. 动量空间中自由粒子波包的传播; 能量算符	69
5. 高斯型波包随时间的变化	71
6. 自由粒子薛定谔方程	73
7. 几率守恒	76
8. 狄喇克括号记法	80
9. 定态	81
10. 箱中的粒子	84
11. 小结	89
第五章 薛定谔方程	93
1. 几率守恒的要求	93
2. 厄密算符	94
3. 对应原理的要求	101
4. 位形空间和动量空间中的薛定谔方程	105
5. 定态	108
6. 厄密算符的本征函数和本征值	112
7. 共可观察量和算符的完全集合	116
8. 测不准原理	118
9. 波包及其运动	122
10. 小结: 量子力学的假设	124
第六章 一维粒子的态	129
1. 概貌	129
2. 按对称性分类; 宇称算符	132
3. 方势阱中的束缚态	135
4. 谐振子	141
5. 产生算符表象	153

6. 波包在谐振子势中的运动	159
7. 方势阱的连续态	163
8. 一般连续态; 几率密度	169
9. 波包穿过势场	172
10. 薛定谔方程的数值解法	175
第七章 近似方法	190
1. WKB 近似	190
2. 瑞利-里兹近似	200
3. 定态微扰理论	207
4. 矩阵	219
5. 简并态	223
6. 含时微扰理论	227
第八章 一维多粒子体系	245
1. 公式表述	245
2. 两个粒子: 质心坐标	248
3. 在有均匀外力存在情况下的相互作用粒子	252
4. 耦合谐振子	255
5. 在有—般外力存在情况下的弱相互作用粒子	258
6. 全同粒子和交换简并	261
7. 两个全同粒子的体系	263
8. 多粒子体系, 对称化和泡利不相容原理	265
9. 三个全同粒子的体系	270
10. 在有—般外力存在情况下的弱相互作用全同粒子	276
第九章 在三维中的运动	283
1. 公式表述: 自由粒子的运动	283
2. 在直角坐标中可分离的势	286
3. 中心势; 角动量态	290
4. 几个例子	301
5. 类氢原子	308

第十章 角动量和自旋	320
1. 轨道角动量算符和对易关系	320
2. 角动量本征函数和本征值	324
3. 转动算符和平移算符	335
4. 自旋: 泡利算符	338
5. 角动量的相加	350
第十一章 某些应用和进一步推广	366
1. 氢原子; 周期表	366
2. 散射理论	375
3. 散射的格林函数; 玻恩近似	384
4. 在电磁场中的运动	397
5. 电子的狄喇克理论	402
6. 混合态和密度矩阵	412
附录	421
I. 含有高斯函数积分的计算	421
II. 可供选择的参考书	424
III. 部分习题的答案和解	428
索引	444
人名索引	461

第一章 物质和辐射的二象性

1. 经典物理学的失败*

十九世纪末叶,大多数物理学家都相信,对自然界的最终描述已经完成,剩下来要解决的只是一些枝节问题。这种信念的根据是牛顿力学,牛顿万有引力理论和麦克斯韦电动力学在描述和预言宏观体系时所取得的惊人的一贯的成就。这里说的宏观体系的大小,其范围从实验室一直到宇宙。然而,一旦实验技术发展到能够研究原子体系水平时,就出现了许多困难。这些困难单靠经典物理学的定律甚至经典物理学的概念是解决不了的。正是量子力学提供了所必需的新定律和新概念,这些定律和概念是在二十世纪头二十五年中发展起来的。

所遇到的困难有好几类。第一类是用优美而普遍的经典均分定理进行某些预言时所遇到的困难。直接应用这个定理就给出错误的甚至是荒谬的黑体辐射谱,而且对物质体系的比热也给出错误的结果。在这两种情况下,经验的结论意味着,只有某些自由度完全参与导致统计平衡的能量交换,而其他自由度则很少参与,甚至不参与能量交换。

其次,在解释原子(带电粒子体系)的结构时遇到了困难,然而事实上这种结构恰恰是真实存在的。就任一种这样的体系而言,在

* 量子力学的实验和历史背景的详细讨论,请见附录 II 中所选文献[1]—[5]。

纯电磁力的作用下,不可能达到静态平衡,同时,在比如像小型太阳系这种形式中,动态平衡同样是不可能达到的。处于动态平衡中的粒子是被加速了的,因为按照经典理论,尽管这些轨道可以具有精确的特性,然而加速的电荷必定要辐射,从而使得轨道迅速坍陷至消失。即使接受原子由于某种原因会设法存在下去这种事实,但在解释原子光谱时仍然存在着问题。原子光谱是一种特征光谱,它是在原子受到扰动而偏离其平衡组态时,由被加速的原子的带电成份发射出来的。根据经典理论,人们预期这种光谱由几个基本频率的谐波所组成。但是,观察到的光谱满足里兹并合定则。这个定则认为,光谱的频率可用少数几个基本频率或谱项之间的差来表示,而不是用它们的倍频来表示。

第三类更特殊的困难可用光电效应来说明。电子从被光照射的表面上进行光电发射的情况,不能用经典理论来解释。基本的困难是:发射出来的电子的数目正比于入射光的强度,因而正比于落在表面上的电磁能量,但是,传递给单个光子的能量完全与照射的强度无关。这个能量反而由光的频率决定,它随着高于某一阈值的频率而线性增加;该阈值表征表面材料的特性。当频率低于此阈值时,完全不会发生光电发射。换一种说法是,当频率低于阈值时,即使有大量的电磁能量传递到表面上,也不会发射光电子。另一方面,当频率高于阈值时,无论光源多么微弱,总有一些光电子发射出来,而且,它们的全部能量总是与该频率相对应。

在1901年普朗克为了按所期望去修改均分定理而假设有能量量子存在之后,这许多困难就开始得到了解释。因而电磁辐射具有微粒特性的含意受到重视,而且在1905年爱因斯坦关于光电发射特性的简单而直接的预言中首次得到确认。两年之后,还是爱因斯坦首先了解到,固体比热的低温特性可以根据普朗克定律用物质客体的内部运动的振动模式取量子化来解释。1913年玻尔

引入了革命性的定态概念并给出了决定它们的量子条件之后，人们才第一次明白了原子结构及其光谱。后来，索末菲和威尔逊推广了这些量子条件，形成的理论几乎圆满地解释了氢原子的光谱及其结构。但是，当企图把玻尔理论应用于较复杂的问题和较复杂的体系时，却遇到了越来越严重的困难。例如，已证实完全无法处理氦原子。从根本上解答这些问题的第一个征兆于1924年出现，当时德布罗意建议，正像光波显示出类粒子的特性一样，粒子也表现出类波动的特性。薛定谔继承了这个建议，于1926年提出了一个以他的名字命名的著名的波动方程。海森堡更早一些时候从完全不同的观点用矩阵的方法得到了等效的数学描述。几乎在同一个时期，乌伦贝克和哥德斯密特引入了电子自旋的概念，泡利宣布了不相容原理，于是非相对论量子力学公式基本上就完善了。

2. 量子力学的概念

量子力学的定律不能推导出来，正像牛顿定律和麦克斯韦方程不能推导出来一样。不过，在理想上，或许有人希望把这些定律当作一系列精选实验的最简单的逻辑结论或多或少地直接地演绎出来。不幸的是，量子力学对自然界的描述太抽象了，以致不可能这样做；量子理论的基本构思已经达到了摆脱日常经验的程度。这些构思是：

态函数 对体系的描述要通过对特殊的函数的详细说明来进行。这种特殊的函数叫做该体系的态函数，它本身不能被观察到。态函数所包含的知识本来就是统计性的或几率性的。

可观察量 对态函数作详细说明，就意味着对所研究的体系的物理性质或属性要有一系列的观察或测量。能测量到的性质，比如能量，动量，角动量以及其他一些力学量，都叫做可观察量。

各种观察或可观察量，都用所谓算符的抽象数学符号来表述。

在观测过程中，测量仪器和待观测体系之间需要有相互作用。根据经典理论，这种相互作用可想像成随人们的意愿要多小就多少。通常令它们为无穷小，这样，体系就不会受到观测的扰动。但是，按照量子理论，相互作用有分立的特征，因而不能被减小到某个确定的限度。于是，观测的作用就使体系受到某种无法消除的而又不可控制的干扰。比如，对某一性质 A 进行观察，就会使另一相关的可观察量 B 发生预计不到的变化。相互作用或扰动存在着绝对限度，这就使得大小的概念具有绝对意义。一个体系可以看作是大的或者是小的，从而可以当作经典力学的或者量子力学的体系来处理，这取决于能否确实把一个给定的不可缩小的相互作用看作是可忽略的或不可忽略的而定。

对一种性质进行精确的观察，就使第二种性质（叫做前一种的互补性质）成为不可观察的了，这种见解完全是量子力学的概念，在经典物理学中没有与此相对应的概念。是类波动的属性还是类粒子的属性，这两者便是一对互补性质的例子。量子力学体系的波-粒二象性表述的是如下事实，即这种体系可呈现出上述两种性质中的任一种性质，这与系统所经受的观测有关。第二对较有定量意义的互补可观察量的例子，是位置和动量这两个力学量。观察粒子的位置时，比如观看它时，就要用光去照射它，这就必定会使粒子的动量受到一定的干扰。这个结论是从光的微粒性得出的；如果对位置进行测量，至少要求有一个光子打到该粒子上。而正是这一碰撞就产生了干扰。在测量和干扰之间存在着这种关系的一个直接结论就是，按照量子理论，粒子的精确轨迹是不能够定义的。有精确的轨迹存在，就意味着能够同时对位置和动量这两者有精确的了解。但是，如果对一个量进行测量就对另一个量产

生显著而不可控制的干扰,那末,就不可能同时对二者有所了解,这正是量子力学体系的情况。我们强调指出,这种相互干扰或不确定性并不是实验技术的问题;而是测量或观察的不可避免的结果。海森堡首先在其著名的测不准原理的陈述中表明,在一对互补变量中必然存在着这种效应。

以后我们还要再讲到这些问题,现在我们想开始讨论量子力学的定律。我们的讨论不用历史上用过的方法,而将遵循下述的途径。首先,在本章余下的篇幅中,我们试图使量子力学的某些概念,特别是使互补性和不确定性的概念看起来是合理的。我们将讨论某些实验和观察以达到这个目的,这些实验和观察着重表明从本质上讲物质具有二象性,并且作为一个直接的结论,还着重表明确不存在牛顿力学的粒子的精确轨迹。这就立刻提出了这样一个问题:量子力学体系的运动状态的特征该如何表示?这种体系该怎样描述?在第二章中,我们引入体系的态函数来回答这个问题。然后讨论它的几率性解释。在第三章中,我们讨论量子力学中可观察量和力学量的一般性质,并给出得到它们的抽象算符表示的规则。其次,在第四、第五两章中,我们引入薛定谔方程以完成建立公式的第一阶段工作,这个方程给出量子体系随时间而变的规律。在第六和第七章中,讨论求解最简单体系——单粒子的一维运动薛定谔方程的方法。只在最后的四章中,我们准备讨论三维空间中相互作用着的粒子体系的一般问题,从而接触到实际的世界。在整个讨论中,我们将不断地应用这样的原理:量子力学定律的预言在适当的极限内必定与经典物理学的预言相对应。我们将会看到,这个对应原理在确定量子力学方程式的形式时起关键作用。

整个讨论的重点放在物质体系的量子力学性质上。由于电磁场的复杂性,我们将不对它的量子性质进行相应的系统的讨论,尽

管有关的量子性质偶然也被肯定,甚至可能被当作是合理的①。

3. 粒子的波动特性

1927年戴维孙和革末首先完成了电子束被金属晶体散射的实验,这个实验几乎与量子力学描述自然界的基本原理无关。他们设计的实验是用来检验德布罗意的预言:按照熟知的光的微粒性来类比,动量为 p 的粒子也与波长为 λ 的波相联系着。现在把 λ 叫做德布罗意波长,可用动量表示:

$$\lambda = h/p$$

普适常数 h 是普朗克常数,或叫作用量子。激励德布罗意的一种愿望是:以半波长的整数倍与玻尔轨道相适应为依据,为理解玻尔的相当武断的量子化条件提供基础。戴维孙和革末观察到,在任何情况下,动量为 p 的电子被晶体散射时的确都按衍射图样分布,正像具有相同波长的X射线被同样的晶体散射时所分布的一样;因此,他们直接地,明确地,定量地证实了德布罗意的假设。

我们注意到作用量子具有动量-长度的量纲,或者等价地具有能量-时间的量纲,它的数值为:

$$h = 6.625 \times 10^{-27} \text{ 尔格} \cdot \text{秒}。$$

在大多数量子力学的应用中,已经证实,使用量值 $h/2\pi$ 更方便,它可简写成 $\hbar$,读作“ h 横”,它的数值为:

$$\hbar \equiv h/2\pi = 1.054 \times 10^{-27} \text{ 尔格} \cdot \text{秒}。$$

利用 $\hbar$,德布罗意关系式可以改写成如下形式:

$$\lambda \equiv \lambda/2\pi = \hbar/p,$$

这里我们引用了约化波长 λ (读作“ λ 横”)。从物理学的观点来看,

① 明确地说,在本章第5节中,要用光的粒子性来说明黑体辐射和康普顿散射的本性。本书要到第七章第6节,在启发性地和半经典地介绍了辐射的发射和吸收之后,才再讲到辐射问题。最后,在第十一章第4节中,我们要扼要地讨论带电粒子在经典的,外加给定的电磁场中的运动。

在描述波的时候, λ 比波长本身更重要。把 λ 的倒数定义为波数 k (严格地讲, 应叫做约化波数) 也是方便的。因此, 我们也可以把德布罗意关系式写成如下形式:

$$p = \hbar k。$$

最后, 为了把这些关系式集中到一个表达式里来, 可以写成:

$$p = h/\lambda = 2\pi\hbar/\lambda = \hbar/\lambda = \hbar k。 \quad (1)$$

德布罗意假设和戴维孙-革末实验在把粒子性和波动性这两种性质归属于同一实体这一点上与经典物理学是尖锐地冲突着的。如把实验想像成按如下方式进行, 则这种冲突的性质和含意就会清楚得多: 这就是把电子束的强度限制到只有单个电子被晶体散射并同时被记录。在那种事例中起初完全观察不到衍射图样; 因为一个给定的电子以显然无规的方式被散射到某个方向上或者其他方向上。不过, 随着时间的推移, 缓慢积累起来的散射电子增加到千百万个, 于是就越来越明显地看到: 较多的电子被散射到某些方向上而不散射到别的方向上, 从而衍射图样也就逐渐显现出来了。

由戴维孙-革末实验的结果可以得出如下结论:

(a) 电子既显示粒子性, 又显示波动性。它们之间的定量关系由德布罗意关系式(1)表示。

(b) 某一电子的确切行为是不能预言的, 而能预言的只是它的可能行为。

(c) 按照量子理论, 精确规定的轨迹是不存在的。

(d) 在给定的区域内观察到一个电子的几率正比于与其相关联的波场的强度。

(e) 可把叠加原理应用于德布罗意波, 正像可应用于电磁波一样。

对结论(a)和(b)不须作进一步的解释。结论(c)由(b)得来,