实用量子力学

上册

[德] S. 福里格　著

宋孝同　高琴　梁仙翠　译

人民教育出版社

实用量子力学

上　册

〔德〕S. 福里格　著

宋孝同　高琴　梁仙翠　译

内 容 简 介

本书根据福里格 (S. Flügge) 所著《Practical Quantum Mechanics》1974 年英文本译出．原书分两卷（合订为一册）出版．中译本分上、下两册出版．上册即原书第一卷．上册内容包括两部分：I．一般概念，II．无自旋的单体问题，共 128 个问题．下册即原书第二卷，包括五部分：III．具有自旋的粒子，IV．多体问题，V．非定态问题，VI．相对论狄拉克方程，VII．辐射理论，共 91 个问题．全部问题都作了详细解答．

本书可供我国高等学校物理专业高年级学生、研究生以及其他有关专业的教师和科研工作者参考．

S. Flügge

Practical Quantum Mechanics

Spinger-Verlag 1974

实 用 量 子 力 学

上 册

〔德〕S. 福里格 著

宋孝同 高琴 梁仙翠 译

*

人民教育出版社 出版

新华书店北京发行所发行

西安新华印刷厂印装

*

开本 850×1168 1/32 印张 11 字数 265,000

1981 年 12 月第 1 版 1983 年 10 月第 1 次印刷

印数 00,001－10,000

书号 13012·0708 定价 1.45 元

序　言

本书在1947年以书名“量子理论的计算方法”用德文首次出版．当时为了达到双重目的：帮助初学量子力学的学生以及从未用量子力学作为工具的实验科学家，掌握将普遍理论运用于原子物理学实际问题的方法．从那时以来，已经写出了许多介绍普遍理论的杰出的书，这对于较为深入的理解是必不可少的．然而在比较实用的方面，看来多少有些被忽视了，当然，对于大量的就专门问题进行详细讨论的专著不在此列．换句话说，到目前为止似乎还没有一本书对量子力学的实际应用作过全面的介绍．而这样一本书可能仍然是有用的．

正是为了填补这一空白，作者同意出版者的愿望，新版用英文写，这样，同先前的德文版相比，新版就能做到既反映最新的成就，又更便于供世界各国的科学家和学习科学的学生使用．

毫无疑问，本书从一开始就必须大加扩充．新的近似方法和其他(特别是散射)方面的进展必须加进去．看来有必要包括相对论量子力学，对于辐射理论至少也要作为波场量子化的一个例子加以简单介绍．早先对问题的选择多少有些随便，而现在必须重新仔细考虑．

问题的数目差不多是原先德文版的两倍．没有一个原来的问题是简单照搬过来的． 大约不超过50个问题是仅按早先的原文加以修改而成的．大部分问题则是首次出现在本版中．尽管如此，本版总的特点仍与原版相同，不过稍微倾向于在每一问题的末尾得出更为实用的结果和数值．

比较基础的问题，如方阱势，并未略去，而是稍加压缩．德文

版中综述基础方程及其意义的引言部分(约20多页)已经删去，因为任何利用本书的学生对这些材料必定是很熟悉的．另一方面，由于本书广泛运用特殊函数，因而有必要增加一个数学附录，其中收集并部分地推导了在问题中用到的那些数学公式．书末索引中的数字是指所讨论的问题的号数而不是页数．

作　　者

1971年3月

平装本序言

自从本书以两卷布面精装本出版以来，三年多过去了，本书受到许多国家科学家的欢迎，并且对学习物理学的学生非常有用，作者和出版者对此感到极为欣慰．但是由于精装本价格昂贵，使得将本书作为教科书的正式补充教材受到限制．因此作者愉快地接受了出版者的建议：发行价格低得多的一卷的斯普林格学生版．

作者和出版者非常希望本书将因此而得到更广泛的发行并将特别满足学生的需要。

作　　者

1974年9月

第 I 卷　目　　录

I. 一 般 概 念

II. 无自旋的单体问题

I. 一 般 概 念

问题1 几率守恒定律

如果归一化关系

$$\int d^3x\psi^*\psi=1 \tag{1.1}$$

是用几率理论解释的，则 $d^3x\psi^*\psi$ 是在体积元 d^3x 内找到所考虑的粒子的几率. 这样必定存在一个守恒定律，试导出此定律，并作出经典解释.

解 所求的守恒定律必定具有如下的连续性方程的形式：

$$\operatorname{div}\boldsymbol{s}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0, \tag{1.2}$$

其中

$$\rho=\psi^*\psi \tag{1.3}$$

是几率密度，$\boldsymbol{s}$ 是几率流密度. 由于 ρ 是 ψ 及其复共轭 ψ^* 的双线性形式，方程(1.2)只能由如下的两个薛定谔方程构成

$$H\psi=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial t};\quad H\psi^*=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \tag{1.4}$$

它们具有相同的哈密顿算符

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\boldsymbol{r}) \tag{1.5}$$

由(1.3)及(1.4)得到

$$\psi^*H\psi-\psi H\psi^*=-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\rho}{\partial t}.$$

按照(1.2)，上式左边应当可以写成散度的形式. 利用(1.5)，的确可以得到

$$\psi^*H\psi-\psi H\psi^*=-\frac{\hbar^2}{2m}(\psi^*\nabla^2\psi-\psi\nabla^2\psi^*)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\operatorname{div}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$$

因此只要规定

$$\boldsymbol{s} = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*), \tag{1.6}$$

就得到所求的守恒定律.

经典解释如下：如果对 ρ 和 $\boldsymbol{s}$ 都乘以粒子的质量 m，则得到质量密度 ρ_m 和动量密度 $\boldsymbol{g}$:

$$\rho_m = m\rho;\ \ \boldsymbol{g} = m\boldsymbol{s}, \tag{1.7}$$

这样一来，连续性方程可以解释为质量守恒定律．同样，如果乘以粒子的电荷 e，则得到电荷密度 ρ_e 和电流密度 $\boldsymbol{j}$:

$$\rho_e = e\rho;\ \ \boldsymbol{j} = e\boldsymbol{s}, \tag{1.8}$$

这时(1.2)式就变成电荷守恒定律.

值得注意的是，质量守恒定律和电荷守恒定律本质上是相同的，这是因为两者都是由同一个粒子的流动所引起的.

由(1.6)和(1.7)可得出薛定谔场的总动量表示式为:

$$\boldsymbol{p} = \int d^3x\boldsymbol{g} = \frac{\hbar}{2i}\int d^3x(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*),$$

对上式第二项分部积分后，可化为

$$\boldsymbol{p} = \int d^3x\psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\psi \tag{1.9}$$

这表明，$\boldsymbol{p}$ 是动量算符 $\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)$ 在量子态 ψ 中的期待值（参见问题3）.

问题 2　薛定谔变分原理

试用对能量的变分原理代替薛定谔方程

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\boldsymbol{r})\psi = E\psi. \tag{2.1}$$

解　微分方程(2.1)的任何解 ψ 均满足约束条件

$$\int d^3x\,\psi^*\psi=1, \tag{2.2}$$

因此用 ψ^* 乘(2.1)式，并对整个空间积分后就得到能量表示式

$$E=\int d^3x\psi^*\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\boldsymbol{r})\psi\right\}. \tag{2.3}$$

上式第一项分部积分后，再利用格林(Green)定理，则得

$$\int d^3x\psi^*\nabla^2\psi=\oint df\,\psi^*\nabla\psi-\int d^3x\nabla\psi^*\nabla\psi. \tag{2.4}$$

由于归一化积分 (2.2) 只有在 ψ 满足下述条件时才存在：即在 $r\to\infty$时，解 ψ 至少具有如下的渐近行为

$$\psi\propto r^{-\frac{3}{2}-\varepsilon};\quad \varepsilon>0,$$

然而，在这个条件下，当积分遍及一个无穷大的球体时，(2.4)式中的面积分为零，于是(2.3)式可以写为

$$E=\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi+\psi^*V(\boldsymbol{r})\psi\right\}. \tag{2.5}$$

(2.5)式和归一化条件(2.2)式一样，对于函数 ψ 和 ψ^* 是完全对称的，因此同样可以由(2.1)式的复共轭式

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*+V(\boldsymbol{r})\psi^*=E\psi^* \tag{2.1*}$$

导出(2.5)式.

不难证明，(2.1)式和(2.1*)式是在约束条件(2.2)下，对积分(2.5)取极值这一变分问题的欧勒方程．然而，我们将不采用变分原理这一工具，而代之以直接的证明.

设 ψ_λ 是(2.1)式的属于本征值 E_λ 的解．代入积分(2.5)，则给出的值是 E_λ．现在我们用邻近函数 $\psi_\lambda+\delta\psi$ 代替 ψ_λ，其中 $|\delta\psi|$ 是小的，但却是任意的，唯一的限制是要求 $\psi_\lambda+\delta\psi$ 象 ψ_λ 一样满足(2.2)式，即

$$\int d^3x(\psi_\lambda^*+\delta\psi^*)(\psi_\lambda+\delta\psi)=1,$$

由此可得

$$\int d^3x(\psi_\lambda\delta\psi^*+\psi_\lambda^*\delta\psi)+\int d^3x\delta\psi^*\delta\psi=0. \qquad (2.6)$$

将 $\psi_\lambda+\delta\psi$ 代入(2.5)式,则能量变为 $E_\lambda+\delta E_\lambda$. 而

$$\delta E_\lambda=\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla\psi_\lambda^*\cdot\nabla\delta\psi+\nabla\psi_\lambda\cdot\nabla\delta\psi^*)+V(\psi_\lambda\delta\psi^*+\psi_\lambda^*\delta\psi)\right\}$$
$$+\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\delta\psi^*\cdot\nabla\delta\psi+V\delta\psi^*\delta\psi\right\}. \qquad (2.7)$$

其中第一行是一级变化量，第二行是二级变化量．利用分部积分法对第一行进行和前面[见(2.4)式]方向相反的运算,就可以回到 $\delta\psi\nabla^2\psi_\lambda^*$ 和 $\delta\psi^*\nabla^2\psi_\lambda$, 再用(2.1)式和(2.1*)式消去含微商的项．例如,我们得到

$$\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi_\lambda^*\cdot\nabla\delta\psi+V\psi_\lambda^*\delta\psi\right\}=E_\lambda\int d^3x\delta\psi\psi_\lambda^*,$$

利用(2.6)式,(2.7)式第一行可化为只含有二级变化量的贡献,最后得到:

$$\delta E_\lambda=\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}|\nabla\delta\psi|^2+(V-E_\lambda)|\delta\psi|^2\right\}. \qquad (2.8)$$

由于在上式中没有 $\delta\psi$ 或 $\delta\psi^*$ 的一次项，因此对于 $\delta\psi=0$(也就是说,当 ψ_λ 是薛定谔方程的解时),E_λ 显然是一个极大值或极小值.至于是极大值还是极小值,将取决于(2.8)式的符号.

为了对上述问题有较深入的理解，我们用 (2.1) 式的一组解 $\{\psi_m\}$ 构成一个完备的正交函数系,

$$\int d^3x\,\psi_\mu^*\psi_\nu=\delta_{\mu\nu}. \qquad (2.9)$$

然后用它将 $\delta\psi$ 展开:

$$\delta\psi=\sum_\nu C_\nu\psi_\nu. \qquad (2.10)$$

代入(2.8)式,则得

$$\delta E_\lambda=\sum_\mu\sum_\nu C_\mu^*C_\nu\int d^3x\left\{\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi_\mu^*\cdot\nabla\psi_\nu+(V-E_\lambda)\psi_\mu^*\psi_\nu\right\}$$
$$=\sum_\mu\sum_\nu C_\mu^*C_\nu\int d^3x\psi_\mu^*\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_\nu+(V-E_\lambda)\psi_\nu\right\}$$

利用(2.1)式和(2.9)式,则上式化为:

$$\delta E_\lambda = \sum_\mu |C_\mu|^2 (E_\mu - E_\lambda). \tag{2.11}$$

如果 E_λ 是基态能量，则对于所有的态 μ，均有 $E_\mu \gg E_\lambda$，因而(2.11)式的总和是正的. 因此变分原理给出的 E_λ 就是一个极小值. 对于激发态，不能建立这样的一般规则，因为这时(2.11)式的求和项中有正有负.

问题 3 空间平均值的经典力学方程

证明经典力学中牛顿的基本方程(其中 $\boldsymbol{p}$ 是粒子的动量，$\boldsymbol{F}$ 是作用于粒子上的力)，

$$\frac{d\boldsymbol{p}}{dt} = \boldsymbol{F}, \tag{3.1}$$

在量子力学中对于相应算符的空间平均值(期待值)仍然成立.

解 如果力 $\boldsymbol{F}$ 是由势导出的，$\boldsymbol{F} = -\nabla V$，而动量用算符 $\frac{\hbar}{i}\nabla$ 代替，则(3.1)式中两个空间平均值定义如下

$$\boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{i}\int d^3x\, \psi^* \nabla \psi; \tag{3.2}$$

$$\boldsymbol{F} = -\int d^3x\, \psi^* (\nabla V) \psi. \tag{3.3}$$

现在的问题在于证明：如果 ψ 和 ψ^* 满足薛定谔方程

$$\left.\begin{aligned} -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V\psi; \\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial \psi^*}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V\psi^*, \end{aligned}\right\} \tag{3.4}$$

则积分(3.2)和(3.3)满足(3.1)式.

首先将(3.2)式对时间求微商：

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \frac{\hbar}{i}\int d^3x (\dot{\psi}^* \nabla\psi + \psi^* \nabla\dot{\psi}) = \frac{\hbar}{i}\int d^3x (\dot{\psi}^* \nabla\psi - \dot{\psi}\nabla\psi^*)$$

上式中第二项分部积分后给出的面积分趋于零，因此已略去. 将(3.4)的 $\dot{\psi}$ 与 $\dot{\psi}^*$ 代入上式后可得

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\int d^3x\,(\nabla^2\psi^*\nabla\psi + \nabla^2\psi\,\nabla\psi^*)$$

$$+\int d^3x\,(\psi^* V\nabla\psi + V\psi\nabla\psi^*)\,. \tag{3.5}$$

利用分部积分

$$\int d^3x\,\nabla^2\psi^*\nabla\psi = -\int d^3x\,\nabla\psi^*\nabla^2\psi$$

可见(3.5)式第一个积分中的两项相互抵消,对第二个积分的第二项作一次分部积分后,则得

$$\dot{\boldsymbol{p}} = \int d^3x\,\psi^*\{V\nabla\psi - \nabla(V\psi)\}.$$

利用等式

$$\nabla(V\psi) = V\nabla\psi + \psi\nabla V,$$

最后得到

$$\dot{\boldsymbol{p}} = -\int d^3x\,\psi^*(\nabla V)\psi = \boldsymbol{F},$$

即得所证。

问题 4　角运动(转动)的经典定律

证明角动量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ 与力矩 $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{F}$(其中 $\boldsymbol{p}$ 代表线动量,$\boldsymbol{F}$ 代表力)所满足的经典关系式

$$\frac{d\boldsymbol{L}}{dt} = \boldsymbol{T}, \tag{4.1}$$

在量子力学中对于空间平均值仍然成立。

解　与问题 3 的做法相同,先定义两个空间平均值

$$\boldsymbol{L} = \frac{\hbar}{i}\int d^3x\,\psi^*(\boldsymbol{r}\times\nabla)\psi \tag{4.2}$$

和

$$\boldsymbol{T} = -\int d^3x\,\psi^*(\boldsymbol{r}\times\nabla V)\psi. \tag{4.3}$$

并假设波函数 ψ 和 ψ^* 满足薛定谔方程(3.4)式。

将(4.2)式对时间求微商: