

量子力学

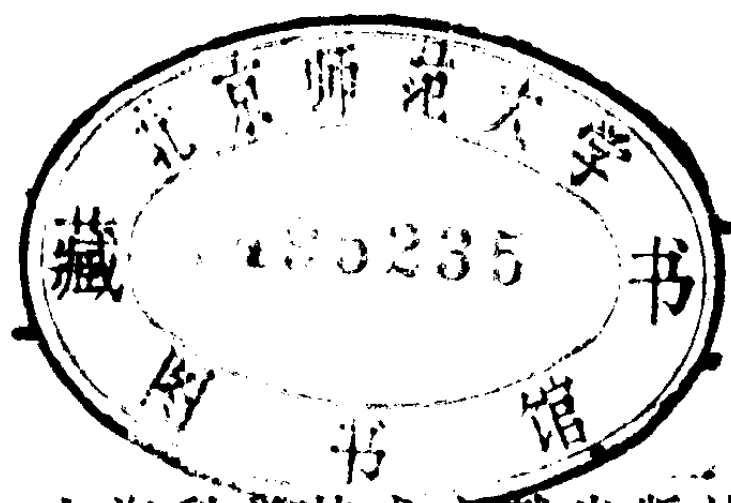
沈仲钧 冯茂仁编

上海科学技术文献出版社

量子力学

沈仲钧 冯茂仁 编著

5-1521/14



上海科学技术文献出版社

量 子 力 学

沈仲钧 冯茂仁 编著

*

上海科学技术文献出版社出版发行
(上海市武康路2号)

总 经 销

昆山亭林印刷厂印刷

*

开本 787×1092 1/32 印张 11.75 字数 284,000

1988年12月第1版 1988年12月第1次印刷

印数: 1—8,000

ISBN 7-80513-178-3/O·08

定 价: 4.20 元

《科技新书目》170-239

序 言

量子力学是研究微观粒子(原子、原子核等线度约 10^{-10} m 量级的客体)运动规律的一门学科。诚然, 范围广大的宏观物理现象可用经典力学来解释, 但是, 到了微观世界, 它就无能为力了。原子的线状光谱, 化学元素的周期律, 化学键的本质等等, 只能在量子力学的基础上才能得到解释。

自从本世纪 60 年代量子力学诞生以来, 它成功地说明了原子及分子的结构, 固体的性质, 辐射的吸收和发射, 超导等物理现象, 它被应用于小到基本粒子, 大到中子星、黑洞的研究。现代物理学的各个分支, 如高能物理、固体物理、核物理、天体物理、激光物理学等等, 无不以它为理论基础。并且, 量子论已渗透到化学和生物学等领域, 形成了量子化学、量子生物学等学科。

量子理论也有着巨大的实用价值。半导体材料和器件, 原子能技术, 激光技术, 超导材料等等都以量子力学的原理为基础。

60 多年来, 无数实验都证明了量子力学原理和方法的正确性, 它是人们认识和改造自然的强大武器。当然, 和其他任何一门自然科学一样, 量子力学是一种相对真理。物理学将继续向前发展。

在本书编写过程中有如下考虑: 从量子力学基本原理出发进行论述, 为了顾及可接受性, 在全面介绍基本原理之前, 先处理一些简单问题, 使学生对量子力学的方法和结论有初步了解;

为了适应师院、师专学生学习的需要,本书特别重视基本概念和基本方法的介绍和分析,数学推导尽量简明扼要,以便于学生将注意力集中于物理主题;注意分散难点,例如将测不准关系、动量表象等内容放在稍后的章节中讨论;重视表象理论的介绍与应用;介绍路径积分表述方式,使读者对量子力学的各种表述方式有一全貌了解;尽量做到深入浅出,便于自学。

本书采用国际单位制。打*号的章节可删节。

本书可作为综合性大学、师范院校和成人高校有关专业的教材或参考书,也可供有关科技人员参考。

马民勋同志参加了部分编写工作,许国保先生和朱宏雄同志对初稿提出了许多宝贵意见,使编者收益非浅,在此表示感谢。错误和欠妥之处,欢迎批评指正。

编 者

1987.1

目 录

第一章 量子力学的实验基础	1
§ 1.1 黑体辐射与普朗克能量子假设	1
§ 1.2 光电效应与爱因斯坦的光量子理论 光的波粒 二象性	4
§ 1.3 康普顿效应	8
§ 1.4 氢原子光谱和玻尔的量子论	10
§ 1.5 德布罗意假设与电子衍射实验 实物粒子的波 粒二象性	13
§ 1.6 量子力学的建立	18
习题	19
第二章 波函数和薛定谔方程	21
§ 2.1 波函数及其统计解释	21
§ 2.2 薛定谔方程	27
§ 2.3 几率守恒	30
习题	33
第三章 简单体系薛定谔方程的解	35
§ 3.1 一维无限深方势阱 宇称	35
§ 3.2 三维无限深方势阱 简并性	41
§ 3.3 一维有限深方势阱	43
§ 3.4 一维谐振子	46
§ 3.5 自由粒子	52
§ 3.6 有限高阶跃势垒的散射	56

§ 3.7	势垒穿透——隧道效应	59
§ 3.8	关于一维束缚态的三个定理	61
	习题	64
第四章	量子力学的基本原理	67
§ 4.1	态及态迭加原理	67
*§ 4.2	阿哈洛诺夫-玻姆(Aharonov -Bohm)效应	69
§ 4.3	算符及其本征值问题	72
§ 4.4	力学量的算符表示	78
§ 4.5	动量算符和位置算符的本征值问题	81
§ 4.6	厄密算符本征函数的正交性和完全性	82
§ 4.7	力学量的测量值和平均值	87
§ 4.8	算符的对易关系 测不准关系	92
§ 4.9	不同力学量同时具有确定值的条件	100
§ 4.10	运动方程	102
§ 4.11	力学量平均值随时间的变化 守恒量	105
*§ 4.12	对称性与守恒定律	107
§ 4.13	全同粒子体系 交换对称性	112
*§ 4.14	体系的对称性与能级的简并性	117
	习题	119
第五章	量子力学的矩阵表示	124
§ 5.1	态的矢量表示 狄拉克符号	124
§ 5.2	表象 量子力学的矩阵表示	128
§ 5.3	坐标表象和动量表象	133
§ 5.4	能量表象	140
*§ 5.5	能量表象中的谐振子	142
§ 5.6	表象的选取和变换	149
*§ 5.7	时间演化算符	153

*§ 6.8 海森堡绘景 海森堡方程	155
习题	159
第六章 角动量	163
§ 6.1 角动量算符及其对易关系	163
§ 6.2 角动量算符的本征值问题	165
§ 6.3 阶梯算符 角动量的矩阵表示	170
习题	178
第七章 中心力场	180
§ 7.1 中心力场的一般性质	180
§ 7.2 两体问题	182
§ 7.3 库仑场 氢原子	184
*§ 7.4 氢原子的对称性	196
习题	198
第八章 自旋	200
§ 8.1 电子自旋概念的提出	200
§ 8.2 电子自旋的实验证明	202
§ 8.3 轨道磁矩和自旋磁矩	203
§ 8.4 电子自旋算符的本征值问题	205
§ 8.5 电子自旋态和自旋算符的矩阵表示	208
§ 8.6 泡利算符和泡利矩阵	210
*§ 8.7 含自旋的波函数和运动方程	213
§ 8.8 均匀磁场中的电子自旋动力学 *磁共振	218
§ 8.9 正常塞曼效应	223
§ 8.10 两个电子自旋的相加	227
*§ 8.11 角动量相加	231
§ 8.12 两个电子的波函数	235
习题	237

第九章 定态微扰论	240
§ 9.1 非简并态微扰论	240
§ 9.2 选择定则	244
§ 9.3 非简并态微扰论的应用实例	246
§ 9.4 简并态微扰论	251
§ 9.5 氢原子的一级斯塔克效应	255
§ 9.6 原子能级的精细结构	257
*§ 9.7 反常塞曼效应	261
§ 9.8 氦原子	263
*§ 9.9 氢分子(海特勒-伦敦法)	267
习题	270
第十章 变分法	273
§ 10.1 里兹变分法	273
§ 10.2 谐振子和氢原子基态的变分法处理	275
§ 10.3 氦原子基态的变分法处理	277
习题	279
第十一章 与时间有关的微扰论——量子跃迁	281
§ 11.1 一级微扰论	282
§ 11.2 周期性微扰	285
§ 11.3 共振宽度和能量——时间测不准关系	290
§ 11.4 原子对电磁辐射的吸收和发射	292
§ 11.5 自发发射	295
§ 11.6 激光原理	298
习题	300
第十二章 散射理论	302
§ 12.1 散射截面	302
§ 12.2 量子力学对散射体系的描写	304

§ 12.3	分波法	306
§ 12.4	玻恩近似	313
*§ 12.5	质心坐标系与实验室坐标系	316
*§ 12.6	全同粒子的散射	319
习题		321
*第十三章	量子力学的路径积分表述方式	325
§ 13.1	传播函数	325
§ 13.2	经典作用量 最小作用量原理	326
§ 13.3	各种路径对传播函数的贡献	327
§ 13.4	路径积分	330
§ 13.5	自由粒子的传播函数	331
§ 13.6	线性谐振子的传播函数	334
§ 13.7	路径积分与薛定谔方程的等价性	336
§ 13.8	传播函数与时间演化算符的关系	338
*第十四章	量子力学与经典力学的关系	340
§ 14.1	海森堡方程与哈密顿正则方程	341
§ 14.2	爱仑菲斯特定理	342
附录		344
附录 1	δ 函数.....	344
附录 2	线性谐振子的能级和波函数	346
附录 3	角动量算符的球坐标表示	350
附录 4	勒让德多项式及球谐函数公式	353
附录 5	电子在库仑场中径向方程的解	356
附录 6	常用积分公式	359
附录 7	物理常数表	360

第一章 量子力学的实验基础

量子力学是在解决经典物理学与实验事实间的矛盾过程中逐步建立和发展起来的。本章将讨论经典物理学无法解释的一些关键性实验事实，并叙述物理学家为解决这些困难所提出的革命性思想和观念，其核心是能量的分立性(不连续性)和物质的波粒二象性，它们是理解量子力学的基础。

§ 1.1 黑体辐射与普朗克能量量子假设

19 世纪末 20 世纪初，经典物理学已经建立起比较完整的体系，并取得了极大的成功。当时许多人认为物理现象的基本规律已被完全揭露，物理学大厦的牢固基础已经形成，以至有人把经典物理学看成是物理学的“最终理论”。著名英国物理学家开尔文在一篇瞻望 20 世纪物理学的文章中说：“在已经建成的科学大厦中，后辈物理学家只要做一些零散的修补工作就行了”。事实上，物理学的规律远非被完全揭露，在一些问题上经典物理学遇到了许多克服不了的困难，其中之一就是黑体辐射问题。

所谓绝对黑体(简称黑体)是指一个能够全部吸收投射在它上面的辐射而无反射的物体。由于带小孔的空腔几乎可吸收入射于其中的全部辐射，所以可以把它近似看作黑体。当空腔壁与腔内的辐射处于热平衡时，腔内单位面积所发出的辐射能量就和它所吸收的辐射能量相等。实验得知，热平衡时辐射能量密度按波长分布的曲线形状和位置，仅与黑体的绝对温度有关，

而与空腔的形状和组成物质无关。

不少物理学家企图用经典理论来说明此能量分布规律，但都没有成功。1896 年德国物理学家维恩通过热力学的讨论得出一个半经验的能量密度分布公式(维恩公式)

$$\rho_T(\nu)d\nu = C_1 \nu^3 e^{-C_2 \nu/T} d\nu, \quad (1.1-1)$$

式中 $\rho_T(\nu)$ 为能量密度, ν 为辐射频率, T 为绝对温度, C_1 与 C_2 为两个经验参数。由图 1-1 可见, 维恩公式在短波部分与实验结果相符, 但在长波部分与实验曲线不符。

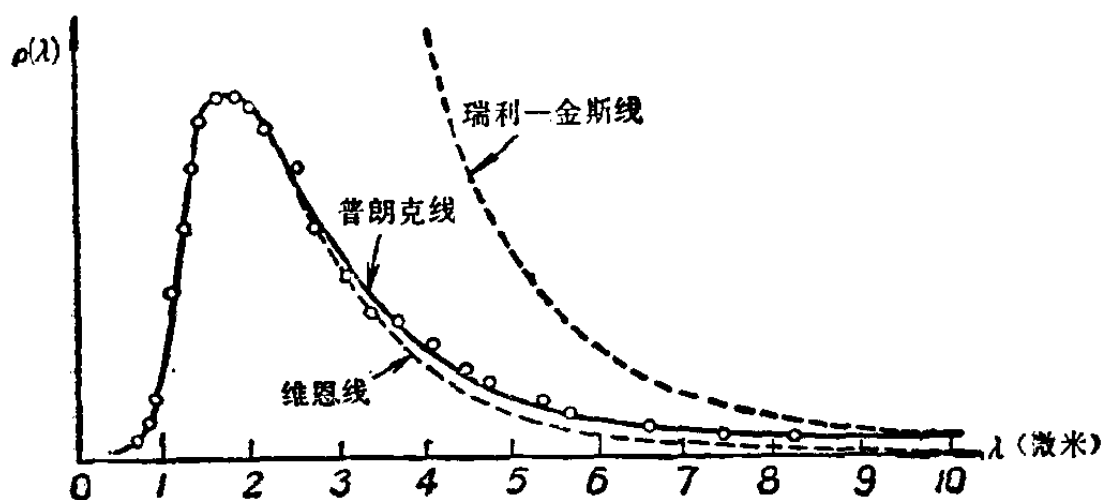


图 1-1 黑体辐射能量密度按波长的分布曲线 ($T=1595\text{ K}$)

英国物理学家瑞利用统计力学与经典电磁理论于 1900 年推导出另一个分布公式, 后由美国物理学家金斯于 1905 年对它作了修改, 人们把这个公式

$$\rho_T(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT d\nu \quad (1.1-2)$$

称为瑞利-金斯公式, 式中 k 为玻尔兹曼常数, c 为真空中的光速, 图 1-1 显示了瑞利-金斯公式在长波部分与实验相符, 而在短波部分与实验极其不符。按此公式, 能量密度随着辐射频率的增加单调地增加, 以至趋向无穷, 即在短波一端发散。人们把这个困难叫做“紫外灾难”。另外, 由此公式得出的总辐射能量

$E(T) = \int_0^{\infty} \rho_T(\nu) d\nu = \infty$ 也与事实完全不符。这暗示着经典物理学面临着严重的危机。

普朗克根据实验结果对维恩公式(1.1-1)作了修改, 建立了一个公式, 并于 1900 年以题为《维恩辐射定律的改进》的论文中, 宣布了这个与实验很好符合的黑体辐射公式:

$$\rho_T(\nu) = \frac{c_1 \nu^3 d\nu}{e^{c_2 \nu/T} - 1} \circ \quad (1.1-3)$$

为了解释上述公式, 普朗克于同年 12 月 14 日在德国物理学年会上宣读了《关于正常光谱的能量分布定律的理论》一文, 提出了“能量子”的概念, 它宣告了量子论的诞生。

普朗克采用瑞利的模型, 认为构成腔壁的各个原子表现为带电谐振子, 每个振子都具有特征的振动频率。这些振子向空腔发射电磁能量, 同时也从空腔吸收电磁能量。普朗克对原子振子实际上作了如下两个假设:

1. 原子振子不可能有任意能量, 其能量值只可能为最小能量单元 $\varepsilon = h\nu$ 的整数倍:

$$E = nh\nu, \quad (1.1-4)$$

式中 ν 为振子频率, h 是常数(现称为普朗克常数, $h = 6.62559 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$), n 为整数。现在已知谐振子的正确能量公式为

$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)h\nu$ 。不过, 这个修改对普朗克的结论无影响。

2. 原子振子(以及空腔中的辐射场)吸收和发射能量也是不连续的, 是“跳跃式”的, 它也只能为 $\varepsilon = h\nu$ 的整数倍。这个最小的能量单元

$$\varepsilon = h\nu \quad (1.1-5)$$

称为“能量子”或“量子”。

基于这些假设, 普朗克用统计物理学方法得到谐振子(以及

空腔中每种频率的波)的平均能量为

$$\bar{\varepsilon}(\nu) = \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}, \quad (1.1-6)$$

而不是

$$\bar{\varepsilon} = kT, \quad (1.1-7)$$

从而推导出普朗克黑体辐射公式

$$\rho_T(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{h\nu/kT} - 1}, \quad (1.1-8)$$

式中 k 为玻耳兹常数。

普朗克假设的实质是,对于一定频率 ν 的电磁辐射,物体只能以 $h\nu$ 为单位吸收或发射它。也就是说在物体吸收和发射辐射的过程中,呈现出辐射的分立性。

普朗克提出的能量子概念,是近代物理学中最重要的概念之一。经典物理学中,能量与其它物理量一样,可以连续地变化。普朗克第一次把分立的能量值的思想引入了物理学,它显示出人类对自然界的认识产生了一个飞跃,普朗克也因作出这一划时代的贡献,而获得了 1918 年度诺贝尔物理学奖。

可是普朗克这一成就,在当时却没有引起人们多大注意,因为他的假设非常不符合公认的传统观念。

首先接受能量变化是不连续的这一革命性思想,并对量子概念的发展起巨大推动作用的是德国物理学家爱因斯坦。他对普朗克的发现给予很高的评价,他说:“这一发现成为 20 世纪物理学研究的基础。”他还在普朗克假设的基础上进一步提出了光子量子学说。

§ 1.2 光电效应与爱因斯坦的光量子理论 光的波粒二象性

光电效应的实验装置如图 1-2 所示。玻璃罩内抽成真空。

罩内有一金属(譬如钾)板 A , 和另一电板 B , 当频率为 ν 的单色辐射通过石英窗照射到金属板 A 时, 金属板就释放出电子, 称为光电子, 当在 AB 两极板上加上电压时, 这些光电子就达到 B 板并通过回路形成电流, 再由电流计 G 测量。光照射到金属板时在其表面上发射电子的现象称为光电效应。光电效应有如下规律:

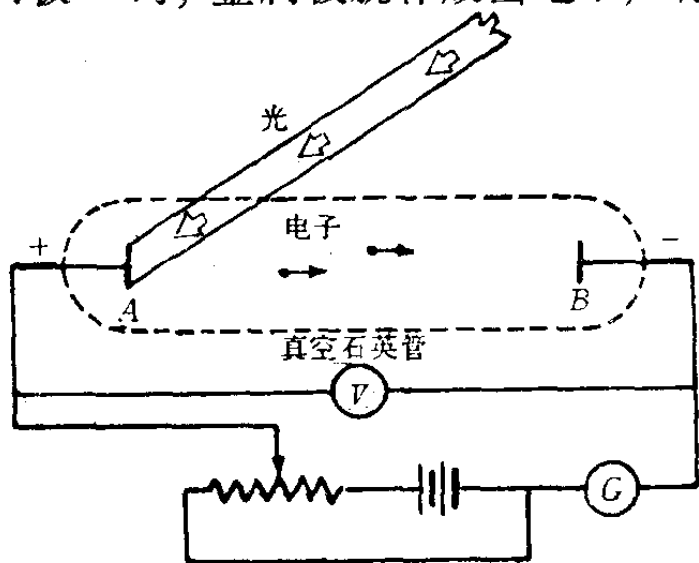


图 1-2 光电效应实验装置示意图

(i) 对于每种金属材料, 都存在一个确定的临界光频 ν_0 。若照射光频率小于 ν_0 时, 则不论光的强度多大, 照射时间多长, 都不会有光电子从金属表面逸出;

(ii) 光电子的能量仅与照射光的频率有关而与它的强度无关。光的频率越高, 光电子的能量就越大, 光的强度只影响光子的数目, 光强越大, 光电子数目就越多;

(iii) 光电效应是瞬时的。只要入射光频率 $\nu > \nu_0$, 不管光多么微弱, 只要光一照到金属板, 在实验精度范围内 (10^{-9} s) 几乎立刻观测到光电子。

经典的波动理论不能对此作出圆满解释。因为:

(i) 按光的电磁理论, 光的能量正比于波幅的平方(光的强度), 因此任何频率的光, 只要有足够的强度, 且照射的时间足够长, 都能使电子获得足够的能量而逸出金属表面。这与光电效应的第一个特点相矛盾。

(ii) 电磁理论认为, 当光束的强度增大时, 光振动的电矢量 E 的数值 $|E|$ 也随之增大, 因此作用于电子上的力 eE 也增

大,从而光电子的动能也增大。这与实验事实是矛盾的。

(iii) 金属中一个电子的“有效靶面积”是有限的,不超过原子的圆面积,且根据经典理论,光能均匀分布于波面上,因此,如果光很微弱,那么从光与金属表面开始接触到光电子发射之间有一个可观测的推迟时间,计算得到的推迟时间一般大于 1s ,这与光电效应的瞬时性是矛盾的。

1905年3月,爱因斯坦发表了《关于光的产生与转化的一个启示性观点》一文,文中他写道:“在我看来,如果假设光的能量是不连续地分布于空间的话,那么我们就可以更好地理解黑体辐射、光致发光、紫外线产生阴极射线以及其它涉及光的产生与转化现象的各种观测结果。根据这种假设,从一点发出的光线传播时,在不断扩大的空间范围内能量不是连续分布的,而是由一个数目有限的局限于空间的能量子所组成,它们在运动中并不瓦解,并且只能整个地被吸收与发射。”爱因斯坦把这些能量子称为“光量子”,后来由莱维斯命名为“光子。”这里,爱因斯坦提出了光子的概念,并认为辐射场由光子所组成。每一光子的能量与相应辐射场的频率之间的关系是

$$E = h\nu \quad (1.2-1a)$$

或

$$E = \hbar\omega, \quad (1.2-1b)$$

这里 ω 是角频率, $\omega = 2\pi\nu$, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, h 也称普朗克常数。

为了解释光电效应,爱因斯坦提出,当光照射到金属表面时,光子的全部能量 $h\nu$ 传递给了电子,电子吸收了光子的能量后,其中一部分能量用来克服金属表面原子引力做功(称为脱出功)使电子逸出金属表面,另一部分能量转化为逸出电子的动能。根据能量守恒定律,有

$$h\nu = \frac{1}{2} mv^2 + A, \quad (1.2-2)$$

式中 $\frac{1}{2} mv^2$ 是电子的最大动能, A 是电子的脱出功。

利用爱因斯坦的光量子理论, 可以圆满解释光电效应的三个特征:

(i) 当 $\frac{1}{2} mv^2 = 0$ 时, 有

$$h\nu_0 = A \quad (1.2-3)$$

这表明频率为 ν_0 的光子刚好能使电子逸出金属表面。如果光子频率低于 ν_0 , 不管光子数目多大(即不管光强多大), 电子都不能获得足够的能量逸出金属表面而成为光电子。

(ii) 从式(1.2-2)可立即看出, 光电子的动能与光子频率有关, 它随着光子频率的增加而增加。对一定频率的光, 光强的增大意味着光子数目增加, 因而导致光电子数目增加。

(iii) 根据光子理论, 电子的能量是直接由光子供给的, 只要光一照到金属表面, 电子即吸收光子而立即逸出金属表面, 所以光电子的发射几乎不需要延迟时间。

爱因斯坦因对光电效应的理论解释而获得 1921 年诺贝尔物理学奖。爱因斯坦的光量子理论不仅成功地解释了光电效应, 更重要的是使人们对光本性的认识产生了一个飞跃。爱因斯坦不仅把光看作是一种波动也看作是一种粒子。光辐射本身就具有粒子性。也就是说光既具有波动性又具有粒子性, 它是具有这两种特性的矛盾统一体。普朗克-爱因斯坦关系式

$$E = h\nu \quad (1.2-1a)$$

和

$$p = \frac{h}{\lambda} n \quad (1.2-4)$$