

专升本

教育部师范教育司组织编写
中学教师进修高等师范本科(专科起点)教材

量子力学

张林芝 主编



高等教育出版社

0413.1
316

教育部师范教育司 组织编写
中学教师进修高等师范本科(专科起点)教材

量子力学

张林芝 主编

高等教育出版社

图书在版编目(CIP)数据

量子力学/张林芝主编. —北京:高等教育出版社,
2000(2004 重印)

ISBN 7-04-008520-8

I. 量… II. 张… III. 量子力学-师范学校:高等
学校-教材 IV. 0413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 17587 号

量子力学

张林芝 主编

出版发行	高等教育出版社	购书热线	010-64054588
社 址	北京市西城区德外大街 4 号	免费咨询	800-810-0598
邮政编码	100011	网 址	http://www.hep.edu.cn
总 机	010-82028899		http://www.hep.com.cn
经 销	新华书店北京发行所		
印 刷	国防工业出版社印刷厂		
开 本	850×1168 1/32	版 次	2000 年 7 月第 1 版
印 张	9.75	印 次	2004 年 5 月第 4 次印刷
字 数	240 000	定 价	12.50 元

凡购买高等教育出版社图书,如有缺页、倒页、脱页等
质量问题,请在所购图书销售部门联系调换。

版权所有 侵权必究

内 容 提 要

本书由教育部师范教育司组织编写,是中学教师进修高等师范本科(专科起点)教材.全书包括微观粒子的波粒二象性与德布罗意假设、波函数与薛定谔方程、力学量的算符表示、微扰理论以及电子自旋与全同粒子体系等内容.本书结构清晰、重点突出、表达简明、深度适中、便于自学.

本书可作为师范类物理专业“专升本”的教材,也可供其他专业的读者参考.

序 言

量子力学是研究微观粒子运动规律的科学。从量子力学的研究对象便可清楚地看到,人们要想深入地认识物质世界,不仅要学好物理学的经典理论,还要很好地学习量子理论。

量子力学建立在经典物理学的基础之上。它虽然只有 60 余年的历史,但它取得的成就是巨大的。现代物理学的许多分支,如高能物理、核物理和固体物理等,无不以它为理论基础。量子力学的影响也越出了传统物理学领域,它渗透到化学和生物学等之中,形成了量子化学和量子生物学等边缘学科。在现代应用科学和现代技术中,量子力学也显示出其强大的生命力,如半导体材料和器件、原子能技术、激光技术等,都用到量子力学的知识。因此,对于物理专业“专升本”的学员来说,量子力学是一门重要的基础课。

量子力学是一门比较难学的学科。一个普遍的困难是人们觉得它的物理概念抽象,物理图象不清晰。譬如,量子力学所用的语言是算符和波函数,而经典力学中轨道的概念在量子力学中不复存在,不确定关系完全破坏了传统的决定论。诸如此类的新观念,使初学者感到难以接受。为了掌握好量子力学的基本概念和原理,初学者首先需要自觉地破除经典观念的束缚,不应试图按经典的模式去认识、解释量子现象。为此,在编写本书时,我们一般从实验事实出发,引出量子力学的基本概念和原理,并且在不失准确性的前提下,尽可能以更宜于接受的方式阐述基本概念和原理。

量子力学的新概念与经典物理学的理论不相容的特点,决定了量子力学在数学表达上的新形式。譬如,用算符表示力学量,借助于算符的本征值来确定力学量的取值。量子力学中的运动方程也有别于经典的运动方程(牛顿方程)。此外,除了高等数学以外,

量子力学还经常与数理方程和特殊函数等比较繁难的数学工具打交道.这给初学量子力学者可能带来一定的困难.为了帮助初学者排除数学上的困难,本书对一些数学问题,都尽可能详细地推导和计算;对某些专门数学知识,书末还编有附录,以资查阅.

本书是为具有物理专业专科学历的中学教师,继续学习获得本科学历而编写的量子力学教材,考虑到在职学习的特点,我们在编写过程中力图体现少而精、突出重点和便于自学的原则.全书重点叙述量子力学的基本概念和原理,对量子力学的应用也作了适当介绍.本书以几个能够严格求解的典型问题作为例子,反复讲解,以加深对概念的理解.对于难以掌握的重点内容,在叙述上采用了直观对比的方法,深入浅出,通俗易懂,便于自学.为了便于读者掌握各章的主要内容,本书在每章的开头给出了内容提要,章末给出了小结.为了帮助读者巩固和检查所学内容,本书各章配置了一定数量的思考题、习题和自测题,并在书后给出了习题和自测题答案.建议师生按照下表安排本课程的课时分配.

课 时 分 配					
章	脱 产		业 余	函 授	
	讲 授	习题课		面 授	自 学
一	4		4	2	8
二	16	4	20	14	25
三	16	4	20	14	25
四	10	2	12	8	18
五	8		8	5	10
六	8		8	5	10

本书由张林芝教授任主编,林琨智副教授参加了第五、六章的编写工作,白建英同志绘制了书中的图表,丁贵贞同志参加了书稿的整理和抄写工作.

吉林大学理论中心吴兆颜教授审查了全书,提出了许多宝贵

意见和建议.编者对他的辛勤劳动表示衷心的感谢.

由于编者水平有限,书中一定还有不少不妥之处,敬请读者批评指正.

目 录

序言	1
第一章 绪论	1
§ 1 经典物理学遇到的困难	1
§ 2 普朗克-爱因斯坦光量子论	7
§ 3 玻尔理论	13
第二章 波函数和薛定谔方程	19
§ 4 德布罗意假设及其实验验证	20
§ 5 德布罗意波的实质	25
§ 6 态和态叠加原理	34
§ 7 动量的概率和以动量为自变量的波函数	36
§ 8 不确定关系	40
§ 9 薛定谔方程	44
§ 10 概率流密度和概率守恒定律	47
§ 11 定态薛定谔方程	51
§ 12 在一维无限深势阱中运动的粒子	54
§ 13 线性谐振子	62
§ 14 隧道效应	73
第三章 力学量的算符表示	84
§ 15 算符的一般性质和运算规则	85
§ 16 力学量对应的算符	93
§ 17 本征值和本征函数	99
§ 18 本征函数的性质	105
§ 19 δ 函数和连续谱	111
§ 20 力学量取各种可能值的概率	119
§ 21 不同力学量同时具有确定值的条件	124
§ 22 表象理论简介	136

§ 23 力学量随时间变化问题和守恒量	152
第四章 氢原子	166
§ 24 角动量算符	167
§ 25 $\hat{L}_z$ 和 $\hat{L}^2$ 的本征值和本征函数	172
§ 26 氢原子	186
§ 27 氢原子核外电子的概率分布	194
§ 28 氢原子的磁矩	202
第五章 微扰理论	210
§ 29 非简并定态微扰理论	211
§ 30 含时微扰理论	221
§ 31 周期性微扰	225
§ 32 光的吸收和发射,选择定则	228
第六章 电子自旋和全同粒子	238
§ 33 电子自旋	239
§ 34 电子的自旋算符和自旋波函数	241
§ 35 正常塞曼效应	249
§ 36 全同粒子的特性	252
§ 37 全同粒子系的波函数	255
§ 38 氦原子	259
附录	270
I. 书中用到的主要数学公式	270
II. 矩阵简介	273
III. 厄米多项式	277
IV. 勒让德多项式	283
V. 拉盖尔多项式	292
VI. 物理常量(数)表	296
习题和自测题参考答案	297
主要参考书目	302

第一章 绪 论

本章着重介绍经典物理学在解释黑体辐射、光电效应和氢原子光谱时遇到的困难以及旧量子论的内容,并用这个理论讨论了氢原子的能级和光谱.

学习目标

1. 了解经典物理学在解释黑体辐射、光电效应、原子的稳定性和氢原子线状光谱上遇到的困难.
2. 能够用普朗克-爱因斯坦光量子论解释黑体辐射、光电效应和康普顿效应.
3. 了解玻尔理论在解释复杂原子光谱时遇到了极大的困难,而量子力学就是为了克服这些困难而建立的.

学习重点、难点

重点:

1. 光的二象性.
2. 玻尔理论和氢原子光谱.

难点:

对光的二象性的正确理解.

§ 1 经典物理学遇到的困难

1. 黑体辐射

到了 19 世纪末,人们已经认识了热辐射与光波都是电磁波. 所有物体不论温度高低都能发出热辐射,也能吸收和反射外来的

热辐射. 如果一个物体能够完全吸收射在它上面的辐射而毫无反射, 则称此物体为绝对黑体. 实际上这种绝对黑体是不存在的, 任何实际物体只能在一定条件下, 近似地看成是绝对黑体. 例如, 一个开有小孔的空腔就是一个近似的绝对黑体, 如图 1-1 所示. 空腔外面的辐射能够通过小孔之后进入空腔内, 在空腔内多次反射, 每反射一次, 空腔的内壁将吸收一部分辐射能. 这样, 经过多次的相继的反射, 进入空腔的辐射能几乎完全被腔壁吸收. 由于小孔的面积远比腔壁的面积小, 所以由小孔反射出的辐射能可以略去不计. 因此, 这开有小孔的空腔把射入小孔内的全部辐射能吸收了. 所以在实验室里把用不透明材料制成的开有小孔的空

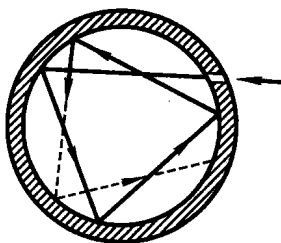


图 1-1 绝对黑体

腔看成绝对黑体(以后简称为黑体). 实验结果表明, 当腔壁与腔内的辐射在某一绝对温度下达到热平衡(腔壁发射的辐射能和吸收的辐射能相等)时, 辐射能量密度 E_ν (单位体积内, 频率 ν 附近单位频率间隔内的辐射能) 随频率 ν 的变化曲线如图 1-2 所示. $E_\nu d\nu$ 表示黑体中, 单位体积内频率在 $\nu \rightarrow \nu + d\nu$ 之间的辐射能量.

维恩利用经典热力学和电动力学给出了辐射能量密度的经验公式

$$E_\nu d\nu = C_1 \nu^3 e^{-\frac{C_2}{T\nu}} d\nu \quad (1.1)$$

C_1 和 C_2 是两个常数, T 为平衡时的绝对温度. 图 1-2 给出了 (1.1) 式的曲线, 从图中清楚地看到, 除了低频部分以外, 与实验曲线是一致的.

瑞利把用经典电磁理论及统计物理学得到的公式

$$E_\nu d\nu = \frac{8\pi}{3} k T \nu^2 d\nu \quad (1.2)$$

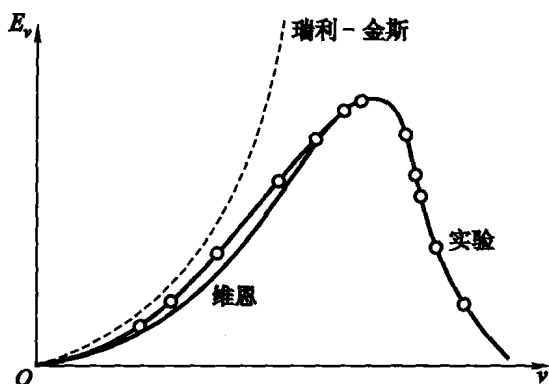


图 1-2 黑体辐射能谱

称为瑞利-金斯公式. 其中 c 为真空中的光速, k 为玻尔兹曼常量. 图 1-2 给出了(1.2)式的曲线, 从图中清楚地看到, 低频部分与实验曲线还比较吻合. 但由(1.2)式容易看到, 当 $\nu \rightarrow \infty$ 时, $E_\nu \rightarrow \infty$, 这显然与实验结果相矛盾, 这就是所谓紫外线发散的困难或紫外线的灾难.

在瑞利-金斯公式和维恩公式的基础上, 普朗克进一步分析实验曲线, 得到了一个很好的经验公式, 即著名的普朗克公式

$$E_\nu d\nu = \frac{C_1 \nu^3 d\nu}{e^{\frac{C_2}{T\nu}} - 1} \quad (1.3)$$

当 $\nu \rightarrow \infty$ 时, $e^{\frac{C_2}{T\nu}} \gg 1$, 这时 $e^{\frac{C_2}{T\nu}} - 1 \approx e^{\frac{C_2}{T\nu}}$, (1.3)式可写成

$$E_\nu d\nu = C_1 \nu^3 e^{-\frac{C_2}{T\nu}} d\nu$$

这正是维恩公式.

把 $e^{\frac{C_2}{T\nu}}$ 展成级数

$$\frac{1}{e^{\frac{C_2}{T\nu}}} = 1 + \frac{C_2 \nu}{T} + \frac{C_2^2 \nu^2}{2T^2} + \dots \quad (1.4)$$

当 $\nu \rightarrow 0$ 时, (1.4) 式可写成

$$\frac{C_1\nu}{e^{\frac{C_2\nu}{T}}} \approx 1 + \frac{C_2\nu}{T}$$

因此, 当 $\nu \rightarrow 0$ 时, (1.3) 式可写成

$$E_\nu d\nu \approx C_1 \nu^3 \frac{T}{C_2 \nu} d\nu = \frac{C_1}{C_2} \nu^2 T d\nu$$

式中的常数 $\frac{C_1}{C_2}$ 相当于 (1.2) 式中的常数 $\frac{8\pi}{3} k$. 也就是当 $\nu \rightarrow 0$ 时,

(1.3) 式变成瑞利 - 金斯公式.

利用经典理论讨论黑体辐射都与实验结果不一致. 也就是说, 经典理论讨论黑体辐射遇到了困难. 普朗克公式虽然解释了黑体辐射, 但它只是一个经验公式.

2. 光电效应

光电效应是金属表面在光照射下发射电子的现象. 这个现象是赫兹在 1888 年发现的. 但当时对其原理并不清楚. 直到 1896 年汤姆孙发现了电子以后, 才认识到光电效应是由紫外线照射金属表面, 大量电子从金属表面逸出的现象. 我们称这种电子为光电子. 实验表明: 对于一定的金属材料做成的电极, 只有当光的频率大于一定值时, 才有可能发射光电子, 我们称这个频率为临界频率. 如果光的频率低于这个值时, 则不论光的强度多大, 照射时间多长, 都没有光电子产生. 光电子的能量与光的频率有关, 而与光的强度无关, 光的频率越高, 光电子的能量就越大. 光的强度只影响光电子数目, 光的强度增大, 光电子的数目就增多.

经典理论认为光是一种波动. 从光的波动观点可这样来解释光电效应, 即当光波照射在金属表面上时, 会引起金属中电子的强迫振动, 随着光波振幅的逐渐增大, 电子振动的振幅也会逐渐增大, 电子的振幅增加到一定程度后, 就会使一些有足够能量的电子脱离金属表面成为光电子. 因为波的强度与振幅的平方成正比, 所以光的强度越大, 光电子的能量也越大. 但是很明显, 这种解释与

上面提到的实验结果矛盾.

3. 氢原子光谱

现在我们可以利用氢气放电管获得氢原子光谱. 在可见光范围内能观察到取名为 H_α 、 H_β 、 H_γ 和 H_δ 的几条谱线. 最早发现氢原子光谱规律性的是巴耳末. 1885 年他在某些星体的光谱中观察到 14 条原子光谱线. 巴耳末发现这些谱线的波数 $\tilde{\nu}$ (波长 λ 的倒数 $\frac{1}{\lambda}$) 可以表示成以下形式

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, 5, \dots \quad (1.5)$$

$R_H = 1.096\,775\,8 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ 是氢原子的里德伯常量. 氢原子光谱的其他谱线系, 也随后被发现. 一个在紫外区, 由拉曼发现, 称为拉曼系. 还有三个在红外区, 分别由帕邢、布拉开和普丰德发现, 称为帕邢系、布拉开系和普丰德系. 这些谱线系也像巴耳末系一样, 可用简单的公式表示, 其公式如下:

$$\left. \begin{array}{ll} \text{拉曼系} & \tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 2, 3, \dots \\ \text{巴耳末系} & \tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 3, 4, \dots \\ \text{帕邢系} & \tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 4, 5, \dots \\ \text{布拉开系} & \tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{4^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 5, 6, \dots \\ \text{普丰德系} & \tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{5^2} - \frac{1}{n^2} \right), n = 6, 7, \dots \end{array} \right\} \quad (1.6)$$

从以上公式可以看出, 氢原子光谱的波数都可以用一个普遍的公式表示, 即

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (1.7)$$

上式中 $m = 1, 2, 3, \dots$, 对于每一个 m , $n = m + 1, m + 2, m + 3, \dots$,

构成一个谱线系。

从(1.7)式看出,每一条谱线的波数都等于两项的差数,即

$$\tilde{\nu} = \frac{R_H}{m^2} - \frac{R_H}{n^2}$$

如果令

$$T(m) = \frac{R_H}{m^2}, T(n) = \frac{R_H}{n^2} \quad (1.8)$$

则有

$$\tilde{\nu} = T(m) - T(n)$$

$T(m)$ 称为光谱项.氢原子的光谱项 $T = \frac{R_H}{n^2}, n = 1, 2, 3, \dots$. 上面讨论的只是氢原子光谱的情况,由此可以概括出三条基本规律:

(1) 光谱是线状的,谱线有一定位置.也就是说,谱线彼此分立,且有确定的波长.

(2) 每一条谱线的波数都可以表示为两光谱项之差,即 $\tilde{\nu} = T(m) - T(n)$, m, n 是某些正整数.这就是光谱学中很有名的普遍成立的并合原则.

(3) 谱线间有一定的关系.一些谱线可构成一个谱线系,它们的波数可以用一个公式表示出来.不同谱线系的谱线也有关系.例如拉曼系和巴耳末系都有共同的光谱项 $\frac{R_H}{2^2}$.

这里总结出来的三条规律,也是所有原子光谱的普遍规律.但不同的原子,它们的线状光谱不同,即光谱项不同.原子为什么会发出线状光谱,波数又为什么那样有规律,以及光谱项的意义等,当时的经典理论都不能解释.实际上,按照经典电磁理论,电子辐射出的电磁波的频率,应等于它在原子内部运动的频率(基频)或它的频率的整数倍(倍频),但这与上面提到的实验规律(并合原则)矛盾.

4. 原子的稳定性

在 20 世纪初,从实验事实已经知道电子是一切原子的组成部

分.但原子通常是电中性的,足见原子中还有带正电的部分.又从电子的荷质比(e/m)的测量中知道,电子的质量比整个原子的质量小得多.当时已经知道,一个电子的质量差不多是氢原子质量的二千万分之一.这些实验事实和当时的经典理论是考虑原子结构的基础.

汤姆孙于 1904 年曾提出如下的原子结构模型:正电荷均匀分布在原子中(原子的半径的数量级为 10^{-10} m),而电子则以某种规律分布在正电荷中.可是,1911 年卢瑟福的 α 粒子散射实验发现有约 $\frac{1}{8000}$ 的 α 粒子作大角散射.但在汤姆孙模型中,正负电荷大体上是均匀分布在原子中,原子对 α 粒子作用较弱,因此不应该出现大角散射.这个实验彻底否定了汤姆孙模型.卢瑟福根据 α 粒子散射实验提出:原子中的正电荷集中在非常小的区域(数量级为 10^{-14} m),这个小区域称为原子核,原子中的电子在核外运动,这就是众所周知的原子有核模型.

原子的有核模型和经典电动力学相矛盾.因为按经典电动力学,电子在核外作加速运动,一定不断发出辐射能,而使电子的能量减少,因此,围绕原子核运动的电子,终究会逐渐减少能量而“掉到原子核中去”.这样,原子就“崩溃”了,也就不会存在稳定的原子.但现实世界,原子是稳定的存在着.这又是一个经典物理学不能解释的事实.

§ 2 普朗克—爱因斯坦光量子论

1. 普朗克的能量子假设

光的电磁理论曾经取得了辉煌的成就,用它可以成功地解释光的干涉、衍射等现象.但是我们已经看到,利用光的电磁理论解释黑体辐射时,得到的能量密度 E_ν 按频率的分布与实验结果不一致.为了克服这个困难,普朗克认为辐射体为许多带电的线谐振

子,这些线谐振子吸收或发射辐射能,而与周围的辐射场交换能量.他发现,为了解释实验结果,必须假设这些线谐振子只能处于这样一些状态中,在这些状态中线谐振子能量只能是某一最小能量 ϵ_0 的整数倍,即线谐振子的能量应为

$$\epsilon_0, 2\epsilon_0, 3\epsilon_0, \dots, n\epsilon_0, \dots$$

ϵ_0 称为能量子.当线谐振子发射或吸收辐射能时,它只能由一状态跃迁到另一状态.因而其发射或吸收的辐射能也是 ϵ_0 的整数倍.也就是说,辐射能量是一份一份的.为了与实验结果相符合,还必须假设最小能量单位 ϵ_0 与辐射频率 ν 成正比,即

$$\epsilon_0 = h\nu \quad (2.1)$$

比例常数 h 称为普朗克常量.根据上述基本假设,普朗克导出了与实验结果完全一致的黑体辐射公式(1.3)式^①.

很明显,普朗克假设中,关于能量不连续的概念是和经典物理学相矛盾的.也就是说,发射或吸收辐射能的过程不是经典物理学的现象,我们称这类现象为量子现象.可以看出,当在某一现象中普朗克常量 h 可以忽略时,则能量不连续性的概念就不存在,从而经典物理学可以适用.因此普朗克常量 h 是量子现象的重要标志.当 h 不能忽略时,就是量子现象,当 h 可以忽略时,就是经典现象.

2. 爱因斯坦的光量子论

为了从理论上解释光电效应,爱因斯坦发展了普朗克假设,进一步提出光量子(光子)的概念,即认为辐射场是光子组成的,每一个光子的能量与辐射场的频率的关系是

$$E = h\nu \quad (2.2)$$

在相对论中能量和动量的关系为

$$E^2 = m^2 c^4 + c^2 p^2 \quad (2.3)$$

^① 周士勋.量子力学.上海科技出版社