中国科学技术大学精品教材

“十二五”国家重点出版物出版规划项目

中国科学技术大学

交叉学科基础物理教程

主编　侯建国　　副主编　程福臻　叶邦角

量子力学导论　第2版

潘必才　编著

中国科学技术大学出版社

中国科学技术大学精品教材
“十二五”国家重点出版物出版规划项目

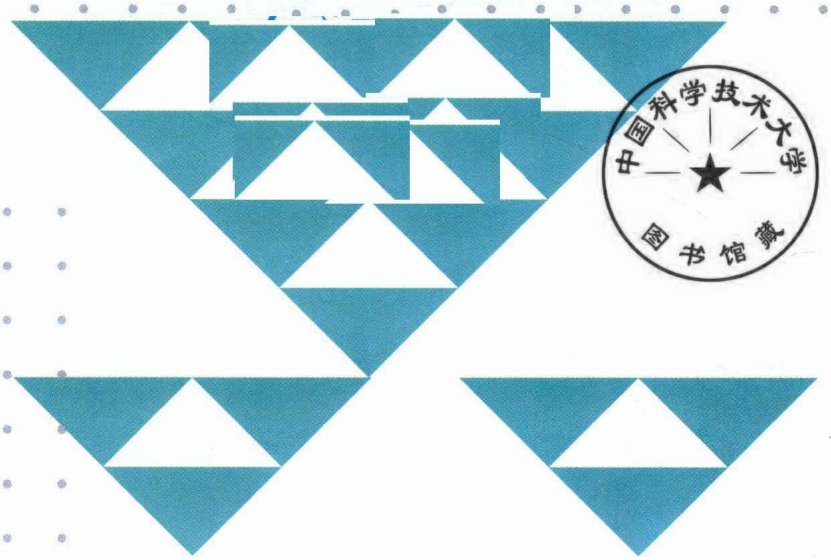
中国科学技术大学

交叉学科基础物理教程

主　编　侯建国　　副主编　程福臻　叶邦角

量子力学导论　第2版

潘必才　编著



中国科学技术大学
图书馆藏

中国科学技术大学出版社

内 容 简 介

本书是针对非物理专业和对理论物理要求不高的物理专业的大学生学习量子力学所编写的教材，也适合初学者自学量子力学。全书包含了初等量子力学的基本假设和基本理论架构：微观粒子的波函数、波动方程、算符、表象、角动量和电子自旋、近似算法（包括对微扰论、变分法和密度泛函理论的简介），同时介绍了初等量子理论在化学、凝聚态物理、核材料、量子通信和量子计算等学科中的应用。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学导论/潘必才编著. —2 版. —合肥：中国科学技术大学出版社，2019.8
（中国科学技术大学交叉学科基础物理教程）
中国科学技术大学精品教材
“十二五”国家重点出版物出版规划项目
安徽省高等学校“十三五”省级规划教材
ISBN 978-7-312-04735-0

Ⅰ. 量… Ⅱ. 潘… Ⅲ. 量子力学—高等学校—教材 Ⅳ. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2019)第 171554 号

出版 中国科学技术大学出版社
安徽省合肥市金寨路 96 号，230026
http://press.ustc.edu.cn
https://zgkxjsdxcbs.tmall.com
印刷 合肥市宏基印刷有限公司
发行 中国科学技术大学出版社
经销 全国新华书店
开本 880 mm×1230 mm 1/16
印张 17
字数 345 千
版次 2015 年 8 月第 1 版 2019 年 8 月第 2 版
印次 2019 年 8 月第 2 次印刷
定价 68.00 元

序

物理学从17世纪牛顿创立经典力学开始兴起，最初被称为自然哲学，探索的是物质世界普遍而基本的规律，是自然科学的一门基础学科。19世纪末20世纪初，麦克斯韦创立电磁理论，爱因斯坦创立相对论，普朗克、玻尔、海森伯等人创立量子力学，物理学取得了一系列重大进展，在推动其他自然学科发展的同时，也极大地提升了人类利用自然的能力。今天，物理学作为自然科学的基础学科之一，仍然在众多科学与工程领域的突破中、在交叉学科的前沿研究中发挥着重要的作用。

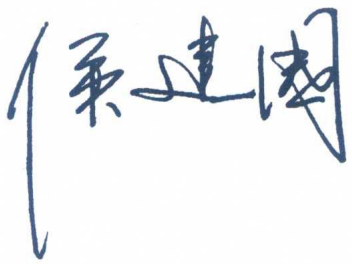
大学的物理课程不仅仅是物理知识的学习与掌握，更是提升学生科学素养的一种基础训练，有助于培养学生的逻辑思维和分析与解决问题的能力，而且这种思维和能力的训练，对学生一生的影响也是潜移默化的。中国科学技术大学始终坚持“基础宽厚实，专业精新活”的教育传统和培养特色，一直以来都把物理和数学作为最重要的通识课程。非物理专业的本科生在一、二年级也要学习基础物理课程，注重在这种数理训练过程中培养学生的逻辑思维、批判意识与科学精神，这也是我校通识教育的主要内容。

结合我校的教育教学改革实践，我们组织编写了这套“中国科学技术大学交叉学科基础物理教程”丛书，将其定位为非物理专业的本科生物理教学用书，力求基本理论严谨、语言生动浅显，使老师好教、学生好

学。丛书的特点有：从学生见到的问题入手，引导出科学的思维和实验，再获得基本的规律，重在启发学生的兴趣；注意各块知识的纵向贯通和各门课程的横向联系，避免重复和遗漏，同时与前沿研究相结合，显示学科的发展和开放性；注重培养学生提出新问题、建立模型、解决问题、作合理近似的能力；尽量做好数学与物理的配合，物理上必需的数学内容而数学书上难以安排的部分，则在物理书中予以考虑安排等。

这套丛书的编写队伍汇集了中国科学技术大学一批老、中、青骨干教师，其中既有经验丰富的国家级教学名师，也有年富力强的教学骨干，还有活跃在教学一线的青年教师，他们把自己对物理教学的热爱、感悟和心得都融入教材的字里行间。这套丛书从2010年9月立项启动，其间经过编委会多次研讨、广泛征求意见和反复修改完善。在丛书陆续出版之际，我谨向所有参与教材研讨和编写的同志，向所有关心和支持教材编写工作的朋友表示衷心的感谢。

教材是学校实践教育理念、达到教学培养目标的基础，好的教材是保证教学质量的第一环节。我们衷心地希望，这套倾注了编者们的心血和汗水的教材，能得到广大师生的喜爱，并让更多的学生受益。



2014年1月于中国科学技术大学

第 2 版前言

在本版中，我们对第 1 版全书进行了校勘和修订，在第 2 章中增加了对算符函数的简单介绍，并对第 3 章中的“表象间的变换”进行了改写。为了简要地介绍产生量子概念的物理背景，本版增设了一个附录。书中增加了少量的例题和习题，并将每章的习题调整为 Part A 和 Part B 这两部分。其中，列入 Part A 的习题为基础题，列入 Part B 的习题是难度较大的习题。

特别感谢合肥工业大学周如龙教授和李冬冬博士在修订过程中提出了宝贵意见。感谢权毓捷和翟泽华修订书中的习题及其解答。

潘必才

2019 年 7 月

第 1 版前言

在 20 世纪的上半叶，非相对论近似下的量子理论已经建立、完善。量子理论的建立极大地推动了物理学的深入发展，这不仅体现在原子分子物理、理论物理和粒子物理领域，凝聚态物理、化学和材料科学的研究也强烈地依赖着量子理论。近十年来，诸如“量子通信”“量子计算”等含有术语“量子”的科技新闻频繁地出现在媒体上。于是，一些远离量子理论的人们也都注意到了量子理论所能带来的神奇现象，他们似乎感受到量子理论的应用离百姓的生活并不遥远。实际上，在现代的日常生活中，我们处处享受着量子理论的成果，例如用发光二极管制成的交通信号灯、日光灯和半导体器件集成的大量电子产品等。随着高新技术的快速发展，量子理论将会在更宽广的非物理类领域中获得越来越多的应用。

非物理类专业在校的大学生和研究生是这些领域中未来的科技工作者的主体，学习量子理论知识对他们未来的工作是十分有益的。然而，学习量子力学并非易事。费曼说过“没有谁理解量子力学”，这是因为量子力学的基本概念和理论构架与经典物理学的相去甚远，常常让初学者困惑不解。即便是物理学科的学生，在学习量子力学时也常常有“如坠云海”的感觉。目前已有的各种量子力学教材主要是针对物理学科学生编写的，不适合用于非物理类学科大学生的学习。鉴于此，我们

编写了本教材。教材采用较为通俗的语言来阐述量子力学的基本概念和理论架构，舍弃了一些理论的细节，特别是忽略了一些非常复杂的方程求解过程和数学技巧，以突出量子理论的要点。这样的处理是为了让读者不要被复杂的数学过程困扰，而将注意力集中于物理图像。

我们假定学习本教材的读者已学习过“原子物理学”。在“原子物理学”中已初步介绍过微观粒子的波-粒性质、波函数的统计解释、不确定性关系、薛定谔方程和氢原子的量子力学解。于是，本教材在第1章中对微观粒子的波粒二象性、概率波和不确定性关系只进行适当的回顾和点评。在后面的五章中，略去了非物理类专业学生感到很困难的内容。例如，略去了算符函数，以及对称性（时间平移不变性、空间平移不变性、空间转动不变性）与守恒量（能量守恒、动量守恒、角动量守恒）的关系。尽管如此，我们尽可能使教材的内容表现出基本完整的理论体系。

为了强调量子力学在应用上的价值，我们将量子力学的一些概念和结果与相关学科的实际应用联系起来，让神秘的量子理论更贴近生活。为此，在书中给出了若干“拓展阅读”。这些“拓展阅读”包括量子尺寸效应、量子剪裁、原子间形成化学键的直观图像、量子通信、量子计算、自旋电子学、磁致冷冰箱的工作原理等内容。最后一章还给出一个简单的第一性原理计算的实例，让读者感受如何采用所学的量子力学知识对一个实际的微观物理体系开展理论计算研究。

在习题的安排上，我们给出了思考题、计算题和证明题。其中，思考题对初学量子力学的读者尤其重要，通过对这些问题的思考，读者能够加深对该章内容的物理图像的理解。习题中只有很少量的难题，这些题均打上了“*”号，作为选做的题。

张永德教授曾经告诫说：“量子力学的教学是如履薄冰的。”的确，在课堂教学中要深入浅出地讲述量子理论的深刻内涵是非常困难的事。而作为量子力学的简明导论，如何才能准确、清晰、易懂地介绍量子力学的基本理论也同样是个挑战。在丛书主编侯建国院士和丛书副主编程福臻教授的鼓励和支持下，编者鼓起勇气编写本书。在本书的编写过程中，张永德教授审阅了书稿的大纲，对内容的安排给予了有益的指导。感谢侯建国院士、谢毅院士、王兵教授和许小亮教授为本书提供了他们的实验结果的彩色图片；感谢朱林繁教授提供了原子光谱与表象理论的

研究成果作为本书的拓展阅读，让读者切实感受表象理论如何用于解释某些实验现象；感谢郭国平教授审阅了书中关于量子态工程的拓展阅读内容。司杭博士和李冬冬博士绘制了书中的一些原始图片；雷雪玲博士通过量子化学计算，提取计算数据，绘制了与原子轨道波函数有关的图片。我的学生韦宗慧和化雪敏解答了本书的习题。

吴强教授、周如龙博士、陆爱江博士等仔细地审阅了书稿，提出了许多有价值的意见。张云鹏校阅了书稿。在2014年全国量子力学年会期间，也有几位教授对书稿的内容提出了建议。中国科学技术大学化学与材料科学学院的李群祥教授、胡水明教授和几位本科生也阅读了书稿，他们从化学专业学生学习量子力学的角度提出了许多建议。朱栋培教授和刘全慧教授细致地审阅了书稿，纠正了书稿中的错误和许多不当之处，提出了非常宝贵的修改意见和建议。

正由于这些宝贵的支持，本书才能顺利出版，我向他们深表谢意！

由于本书编者学识有限，教材中难免会有许多不足之处，恳请读者批评指正。

潘必才

2015年4月

致 读 者

在阅读本书之前，读者要有原子物理学的基础，特别是已经了解了玻尔的氢原子理论。由于量子理论本身是个“非常奇怪”的理论，建议读者在阅读本书时，要将主要精力用于仔细地思考和感悟量子理论中的概率波的概念。为了加深对微观粒子波-粒性的深入理解，在学习量子力学的过程中，尽可能地将学习的内容与波-粒性相关联。这样的关联也能帮助读者加深对微观体系新奇的物理现象和规律的理解。

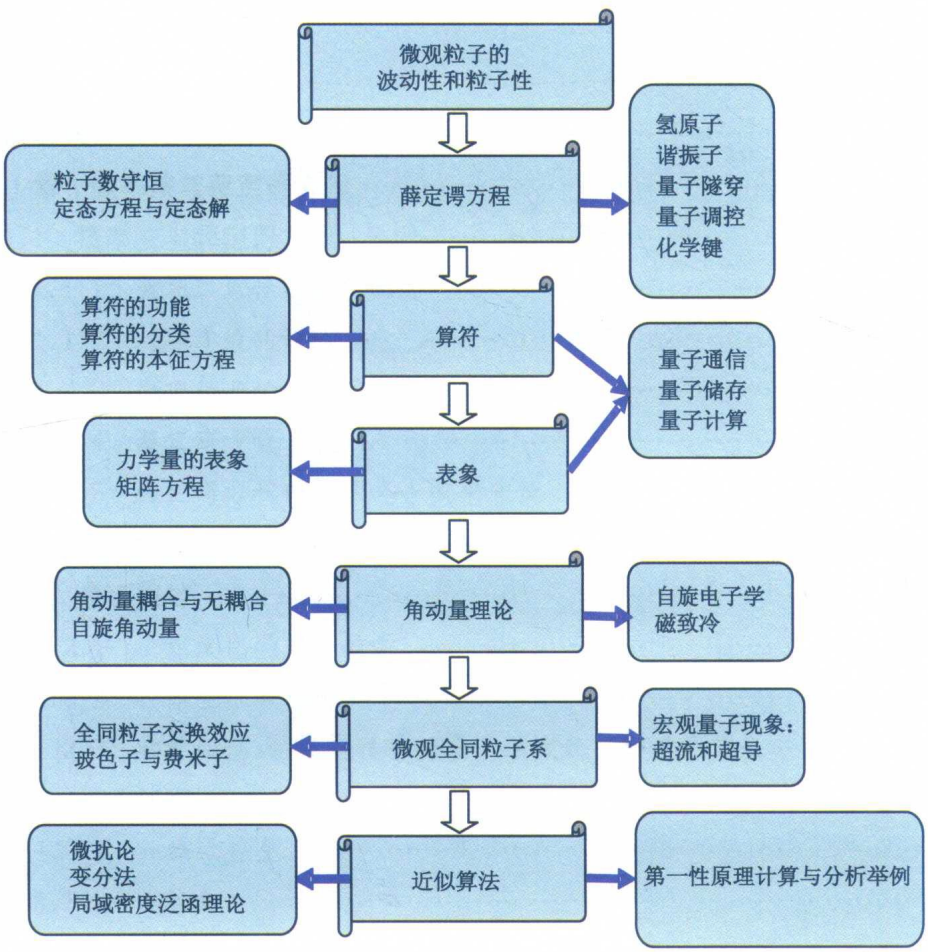
尽管本书是一本简明的导论(不是科普读物)，依然要用数学的语言表述量子理论中的基本知识，这是不可回避的现实。所以，读者要有基本的矩阵代数和线性空间的知识，能求解简单的偏微分方程。

许多非物理非数学专业的学生在学习物理时，一遇到稍复杂的数学公式及其推导就会产生一定程度的排斥心理。实际上，数学仅仅是表达物理内容的工具，读者在读物理书的过程中见到数学公式时，要深入思考这些数学公式表述了什么样的物理内容。如果采用这样的思考方式，读者就不会被数学的形式所困扰。另外，为了减少复杂的数学过程对读者阅读的干扰，本书回避了对特殊方程的求解过程，主要强调物理问题的提出和对结果的讨论。

此外，我们特意在页边空白处对有关内容作了一些通俗性的注解。

有些注解是提醒该处内容与前面的某个或某些内容的关联，这能帮助读者将前后的相关知识联系起来；有些注解则是对该处数学处理的物理原因或数学技巧的交代。希望这样的编排能增强本书物理内容的可读性。

路 线 图


微观粒子的
波动性和粒子性
薛定谔方程
粒子数守恒
定态方程与定态解
氢原子
谐振子
量子隧穿
量子调控
化学键
算符
算符的功能
算符的分类
算符的本征方程
量子通信
量子储存
量子计算
表象
力学量的表象
矩阵方程
角动量理论
角动量耦合与无耦合
自旋角动量
自旋电子学
磁致冷
微观全同粒子系
全同粒子交换效应
玻色子与费米子
宏观量子现象：
超流和超导
近似算法
微扰论
变分法
局域密度泛函理论
第一性原理计算与分析举例

目　录

序 …… (i)
第 2 版前言 …… (iii)
第 1 版前言 …… (v)
致读者 …… (ix)
路线图 …… (xi)
例题目录 …… (xix)
第 1 章　概率波与薛定谔方程 …… (1)
1.1　概率波与薛定谔方程 …… (1)
1.1.1　波粒二象性的简要回顾 …… (1)
1.1.2　对概率波的评述 …… (3)
1.1.3　微观粒子的状态用波函数描述 …… (7)
1.1.4　薛定谔方程 …… (9)
1.1.5　薛定谔方程的推论——概率守恒 …… (10)
1.1.6　定态薛定谔方程 …… (12)
1.2　量子限域 …… (14)
1.2.1　一维定态的若干性质 …… (14)
1.2.2　一维无限深势阱 …… (17)
1.2.3　拓展阅读：纳米科技中的量子限域效应和量子剪裁 …… (22)
1.3　量子隧穿 …… (25)
1.3.1　一维方势垒 …… (25)
1.3.2　δ 势垒 …… (30)
1.3.3　拓展阅读：扫描隧道显微镜 …… (36)

1.4 线性谐振子 …… (37)
1.4.1 势能函数 …… (37)
1.4.2 定态解 …… (38)
1.5 氢原子 …… (42)
1.5.1 氢原子的量子力学解 …… (43)
1.5.2 氢原子的能谱 …… (45)
1.5.3 电子在空间上的概率分布 …… (46)
1.5.4 化学键的直观图像 …… (49)
1.5.5 磁矩 …… (51)
本章小结 …… (52)
第 2 章 力学量与算符 …… (53)
2.1 数学基础 …… (53)
2.1.1 复矢量的基本运算规则 …… (53)
2.1.2 希尔伯特空间简介 …… (54)
2.1.3 狄拉克符号 …… (55)
2.2 算符 …… (57)
2.2.1 算符的基本功能 …… (57)
2.2.2 算符的本征方程 …… (58)
2.2.3 算符的基本运算规则 …… (58)
2.2.4 算符的分类 …… (60)
2.2.5 算符函数 …… (68)
2.3 几种常见的算符及其本征值和本征态 …… (68)
2.3.1 位置算符 …… (69)
2.3.2 动量算符 …… (71)
2.3.3 角动量算符 …… (74)
2.3.4 动能算符 …… (78)
2.3.5 哈密顿算符 …… (78)
2.4 平均值假设 …… (79)
2.4.1 力学量的平均值 …… (79)
2.4.2 守恒量 …… (83)
2.4.3 量子态的测量 …… (84)
2.5 不确定性关系 …… (86)
2.5.1 不确定性关系式的严格证明 …… (87)

2.5.2 共同本征态 …… (88)
2.5.3 力学量完全集 …… (89)
本章小结 …… (91)
第3章 量子态与力学量的表象 …… (93)
3.1 表象理论初步 …… (94)
3.1.1 F表象 …… (95)
3.1.2 态矢、内积和算符的矩阵形式 …… (96)
3.2 几种常见的表象 …… (99)
3.2.1 坐标表象(以一维为例) …… (99)
3.2.2 动量表象 …… (101)
3.2.3 能量表象 …… (103)
3.3 表象间的变换 …… (107)
3.3.1 表象变换矩阵 …… (107)
3.3.2 波函数的表象变换 …… (109)
3.3.3 力学量的表象变换 …… (110)
3.3.4 物理内容与表象无关 …… (113)
3.4 采用原子轨道线性组合表象求解氢分子离子 …… (115)
3.5 拓展阅读:量子(态)工程 …… (118)
3.5.1 量子存储 …… (118)
3.5.2 量子信息的隐形传输 …… (119)
3.5.3 量子计算 …… (123)
本章小结 …… (126)
第4章 角动量与自旋 …… (127)
4.1 角动量理论初步 …… (127)
4.1.1 角动量的一般性质 …… (127)
4.1.2 $(\hat{j}^2,\hat{j}_z)$表象中角动量算符的矩阵形式 …… (130)
4.1.3 两个角动量的耦合 …… (133)
4.1.4 用无耦合表象的基矢展开耦合表象的基矢 …… (136)
4.2 电子自旋 …… (138)
4.2.1 自旋算符与自旋本征态表象 …… (138)
4.2.2 泡利算符 …… (141)
4.2.3 双电子自旋态的耦合 …… (143)
4.2.4 拓展阅读:角动量表象理论在原子激发谱分析中的应用 …… (148)

4.3 电子与电磁场的相互作用 …… (152)
4.4 拓展阅读:电子自旋输运 …… (156)
4.5 拓展阅读:磁致冷冰箱原理 …… (157)
本章小结 …… (159)
第 5 章 多粒子体系与全同性原理 …… (161)
5.1 多粒子体系的分类 …… (162)
5.1.1 微观粒子的全同性 …… (162)
5.1.2 全同粒子的不可分辨性 …… (162)
5.1.3 全同粒子的交换不变性 …… (163)
5.2 全同粒子系的波函数 …… (166)
5.2.1 两粒子体系 …… (166)
5.2.2 多粒子体系 …… (170)
5.3 对比玻色子、费米子、非全同粒子系中粒子的交换效应 …… (171)
5.4 拓展阅读:超流和超导 …… (174)
5.4.1 液氦超流 …… (174)
5.4.2 超导 …… (176)
本章小结 …… (177)
第 6 章 微扰论和变分法 …… (179)
6.1 非简并定态微扰论 …… (179)
6.1.1 物理思想 …… (179)
6.1.2 近似处理的方案 …… (181)
6.1.3 零级近似 …… (182)
6.1.4 一级近似 …… (182)
6.1.5 二级近似 …… (183)
6.1.6 评述 …… (184)
6.2 简并定态微扰论 …… (189)
6.3 含时微扰理论 …… (194)
6.3.1 近似处理的方案 …… (194)
6.3.2 周期微扰 …… (196)
6.4 变分法 …… (199)
6.4.1 薛定谔方程与变分原理 …… (199)
6.4.2 由变分原理求体系能量 …… (201)
6.4.3 Ritz 变分法 …… (202)

6.5 密度泛函理论简介 …… (205)
6.5.1 Thomas-Fermi 理论 …… (205)
6.5.2 非均匀电子气的能量 …… (208)
6.5.3 Hohenberg-Kohn 定理 …… (209)
6.5.4 理论的改进 …… (210)
6.5.5 Kohn-Sham 方程 …… (210)
6.6 拓展阅读：第一性原理计算与分析举例 …… (214)
本章小结 …… (218)
习题 …… (219)
部分习题参考答案 …… (226)
参考书目 …… (231)
附录 A 产生量子概念的历史背景 …… (232)
附录 B 一维谐振子的求解过程 …… (234)
附录 C 平面波的归一化 …… (236)
附录 D 动量表象中的坐标算符的数学形式 …… (237)
附录 E $\hat{\vec{j}}^2$ 的本征值为 $j(j+1)\hbar^2$ 的证明 …… (238)
附录 F j_1 是任意值、$j_2=\frac{1}{2}$ 时的 C-G 系数公式的推导 …… (240)
附录 G 二级近似下的能量 …… (243)
附录 H 含时微扰体系在一级近似下的波函数展开系数的推导 …… (244)
附录 I 附录 H 中式(5)的证明 …… (245)
名词索引 …… (246)