量子力学与统计物理导论

参考教材

量子力学教程（第二版）周世勋原著 陈灏修订

热力学 统计物理（第五版）汪志诚

教学内容

第一章 绪论

第二章 波函数和薛定谔方程

第三章 量子力学中的力学量

第四章 态和力学量表象

第五章 微扰理论

第六章 自旋与全同粒子

第七章 统计分布规律

第一章　绪论

§1.1　经典物理学的困难

§1.2　光的波粒二象性

§1.3　原子结构的波尔理论

§1.4　微粒的波粒二象性

§1.1 经典物理学的困难

（1）经典物理学的成功

- 应用牛顿方程成功的讨论了从天体到地上各种尺度的力学客体的运动。汤姆森在1897年发现了电子，这个发现表明电子的行为类似于一个牛顿粒子。
- 麦克斯韦在1864年发现的光和电磁现象之间的联系把光的波动性置于更加坚实的基础之上。
- 热现象理论有完整的热力学以及玻尔兹曼、吉布斯等人建立的统计物理学。

（2）经典物理学的困难

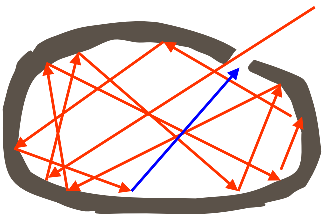
经典理论无法解释新的物理现象:

黑体辐射　光电效应　原子光谱　低温比热

§1.2 光的波粒二象性

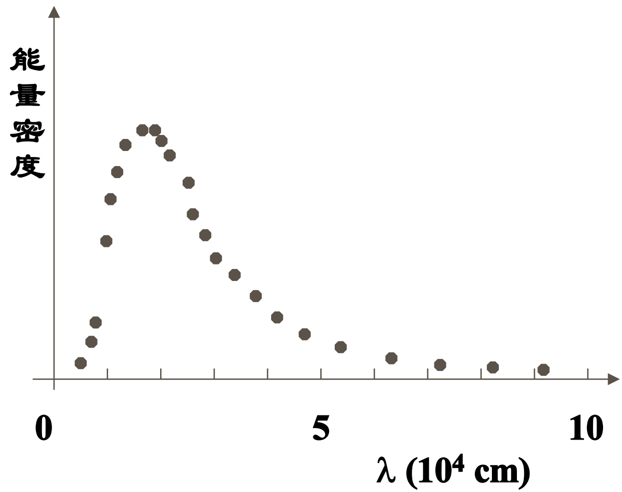
（1）黑体辐射

黑体：能吸收射到其上的全部辐射的物体，这种物体就称为绝对黑体，简称黑体。



黑体辐射：由这样的空腔小孔发出的辐射就称为黑体辐射。

辐射热平衡状态：处于某一温度 T 下的腔壁，单位面积所发射出的辐射能量和它所吸收的辐射能量相等时，辐射达到热平衡状态。

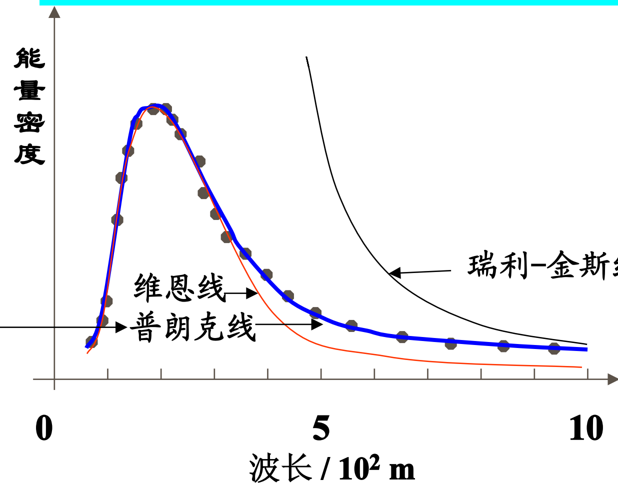


实验发现：热平衡时，空腔辐射的能量密度，与辐射的波长的分布曲线，其形状和位置只与黑体的绝对温度 T 有关而与黑体的形状和材料无关。

普朗克假定：黑体以E = hv为能量单位不连续地发射和吸收辐射能量，h为常数

普朗克辐射定律

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{C^3}\left(\frac{1}{\exp(h\nu/kT)-1}\right)d\nu$$



讨论 $$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{C^3}\left(\frac{1}{\exp(h\nu/kT)-1}\right)d\nu$$

- (1) v很大(波长很短), exp(hv /kT)-1 ≈ exp(hv /kT)

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{C^3}\left(\frac{1}{\exp(h\nu/kT)-1}\right)d\nu \rightarrow \rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{C^3}\exp(-h\nu/kT)d\nu$$

Wien $\rho_\nu d\nu = C_1\nu^3\exp(-C_2\nu/T)d\nu$

- (2) v很小(波长很长), exp(hv /kT)-1 ≈ [1+(h v /kT)]-1=(h v /kT)

$$\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{C^3}\left(\frac{1}{\exp(h\nu/kT)-1}\right)d\nu \rightarrow \rho_\nu d\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{C^3}\frac{kT}{h\nu}d\nu = \frac{8\pi}{C^3}\nu^2 kT d\nu$$

Rayleigh – Jeans $\rho_\nu d\nu = \frac{8\pi}{C^3}kT\nu^2 d\nu$

(2) 光电效应

光照射到金属上，有电子从金属中逸出；逸出的电子称为光电子。

两个特点：存在临界频率、光电子能量只与光的频率有关

爱因斯坦第一个完全肯定光除了波动性外还具有微粒性，他指出：

电磁辐射在被发射和吸收时以能量为hν的微粒形式出现，这种形式以速度c在空间运动，这种粒子称为光量子或光子。

$$\frac{1}{2}\mu V^{2} = h\nu - A$$

（3）光（量）子的动量

光子能量E = hv，由相对论知，具有速度为V的粒子的能量为

$$E = \frac{\mu_0 C^2}{\sqrt{1-\frac{V^2}{C^2}}}$$

μ_0 为粒子静止质量，对光子，**V=C**，$\mu_0 = 0$

根据能量与动量的关系：

$$E^2 = (\mu_0 C^2)^2 + (pC)^2 = (pC)^2 \qquad E = pC \quad \text{or} \quad p = E/C$$

$$\begin{cases} E = h\nu = \hbar\omega \\ \vec{p} = \frac{E}{C}\vec{n} = \frac{h\nu}{C}\vec{n} = \frac{h}{\lambda}\vec{n} = \frac{\hbar}{\lambdabar}\vec{n} = \hbar\vec{k} \end{cases}$$

波粒二象性

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \qquad \lambdabar = \frac{\lambda}{2\pi} \qquad \vec{k} = \frac{\vec{n}}{\lambdabar}$$

（3）光量子理论的证实--康普顿效应

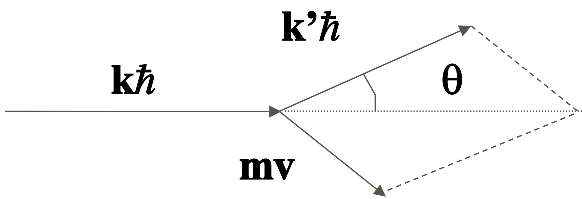
康普顿效应：高频率的X射线被轻元素中的电子散射后波长随散射角增加而增大，即

1）λ’>λ;　　2）Δλ=λ’-λ 随散射角增加

如果将X射线视为光子，这种效应可以理解。

能量守恒

动量守恒



$$\begin{cases} \hbar\omega - \hbar\omega' = mc^2 - m_0c^2 \\ \hbar\vec{k} - \hbar\vec{k}' = m\vec{v} \end{cases} \longleftarrow \omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi c}{\lambda} = \frac{c}{\lambda\!\!\!^{-}} = kc$$

$$\hbar c(k - k') = (m - m_0)c^2$$

$$\downarrow$$

$$\hbar^2(k^2 + k'^2 - 2kk') = (m - m_0)^2c^2 \qquad (1)$$

$$\hbar^2(k^2 + k'^2 - 2kk'\cos\theta) = (mv)^2 \qquad (2)$$

（2）—（1）： $$\hbar^2 2kk'(1-\cos\theta) = (mv)^2 - (m^2 + m_0^2 - 2mm_0)c^2$$

$$4\hbar^2 kk'\sin^2\frac{\theta}{2} = m^2(v^2 - c^2) - m_0^2c^2 + 2mm_0c^2$$

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

$$= \frac{m_0^2}{1-\frac{v^2}{c^2}}(v^2 - c^2) - m_0^2c^2 + 2mm_0c^2$$

$$= \frac{m_0^2c^2}{-(v^2-c^2)}(v^2 - c^2) - m_0^2c^2 + 2mm_0c^2$$

$$= 2m_0(m - m_0)c^2$$

$$\hbar\omega - \hbar\omega' = mc^2 - m_0c^2$$

$$\omega = kc$$

$$= 2m_0\hbar(\omega - \omega')$$

$$= 2m_0\hbar c(k - k')$$

$$2\sin^2\frac{\theta}{2} = \frac{m_0c}{\hbar}\left(\frac{k-k'}{kk'}\right)$$

$$2\sin^2\frac{\theta}{2}=\frac{m_0c}{\hbar}\left(\frac{k-k'}{kk'}\right)=\frac{m_0c}{\hbar}\left(\frac{1}{k'}-\frac{1}{k}\right)=\frac{m_0c}{\hbar}(\lambdabar'-\lambdabar)$$

$$\lambdabar=\frac{\lambda}{2\pi}\quad\Longrightarrow\quad=\frac{m_0c}{\hbar}\Delta\lambdabar=\frac{m_0c}{2\pi\hbar}\Delta\lambda$$

$$\Delta\lambda=2\frac{2\pi\hbar}{m_0c}\sin^2\frac{\theta}{2}=2\lambda_0\sin^2\frac{\theta}{2}$$

其中

$$\lambda_0=\frac{2\pi\hbar}{m_0c}=2.4\times10^{-10}cm$$

电子 *Compton* 波长

§1.3 原子结构的波尔理论

Planck--Einstein 光量子概念必然会促进物理学其他重大疑难问题的解决。1913年 Bohr 把这种概念运用到原子结构问题上，提出了他的原子的量子论。该理论今天已为量子力学所代替，但是它在历史上对量子理论的发展曾起过重大的推动作用，而且该理论的某些核心思想至今仍然是正确的，在量子力学中保留了下来

- （1）波尔假定
- （2）氢原子线光谱的解释
- （3）量子化条件的推广
- （4）波尔量子论的局限性

1885年，瑞士巴尔末发现紫外光附近的一个线系，并得出氢原子谱线的经验公式

$$\nu = R_H C\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n = 3,4,5,\cdots$$

其中 $R_H = 1.09677576 \times 10^7 m^{-1}$ 是氢的 Rydberg 常数，C 是光速。

以后又发现了一系列线系，它们都可以用下面公式表示

$$\nu = R_H C\left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n > m$$

氢原子光谱

谱系	m	n	区域
Lyman	1	2, 3, 4, ...	远紫外
Balmer	2	3, 4, 5, ...	可见
Paschen	3	4, 5, 6, ...	红外
Brackett	4	5, 6, 7, ...	远红外
Pfund	5	6, 7, 8, ...	超远红外

波尔假定

1）原子具有能量不连续的定态

2）量子跃迁

$$\nu_{mn}=[E_n-E_m]/h$$

$\rightarrow$ 频率条件

3）角动量量子化

电子的角动量 L 只能

取 $\hbar$ 的整数倍，即

$$L=n\hbar$$

其中 $n=1,2,3\cdots$

Rydberg 常数 $R_H=\dfrac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3 c}$ 与实验结果一致

索末菲将 Bohr 量子化条件推广为推广后的量子化条件可用于多自由度情况，

$$\oint p_i dq_i = n_i h$$

其中 p_i是广义动量， q_i是相应的广义坐标。

这样索末菲量子化条件不仅能解释氢原子光谱，而且对于只有一个电子（Li，Na，K 等）的一些原子光谱也能很好的解释。

局限性:

1. 不能证明较复杂的原子，如比氢稍微复杂的氦原子的光谱;

2）不能给出光谱的谱线强度。

原因：把微观粒子看作是质点，把经典力学的规律作用在微观粒子上。

发展：微观粒子波粒二象性的认识与量子力学的建立。

§1.4 微粒的波粒二象性

(1) 德布罗意关系

根据Planck-Einstein 光量子论，光具有波动粒子二重性，以及Bohr量子论，启发了de. Broglie，他提出了实物粒子（静质量 m 不等于 0 的粒子）也具有波动性。也就是说，粒子和光一样也具有波动-粒子二重性，二方面必有类似的关系相联系。

• 假定：与一定能量 E 和动量 p 的实物粒子相联系的波（他称之为"物质波"）的频率和波长分别为：

$$E = h\nu \Rightarrow \nu = E/h \Rightarrow \omega = 2\pi\nu = 2\pi E/h = E/\hbar$$

$$P = h/\lambda \Rightarrow \lambda = h/p \Rightarrow k = 1/\lambda\!\!\!^{-} = 2\pi/\lambda = p/\hbar$$

该关系称为de. Broglie关系。

(2) 德布罗意波

因为自由粒子的能量 E 和动量 p 都是常量，所以由de Broglie 关系可知，与自由粒子联系的波的频率 ν 和波矢k（或波长 λ ）都不变，即是一个单色平面波。由力学可知，频率为 ν ，波长为 λ ，沿单位矢量 n 方向传播的平面波可表为：

$$\Psi = A\cos[\vec{k}\bullet\vec{r} - \omega t] \qquad \text{其中}\ \omega = 2\pi\nu, \qquad \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}。$$

写成复数形式

$$\begin{aligned}\Psi &= A\exp[i(\vec{k}\bullet\vec{r} - \omega t)] \\ &= A\exp\left[\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\bullet\vec{r} - Et)\right]\end{aligned}$$

这种波就是与自由粒子相联系的单色平面波，或称为描写自由粒子的平面波，这种写成复数形式的波称为 de Broglie 波

(3) 戴维孙-革末电子衍射实验

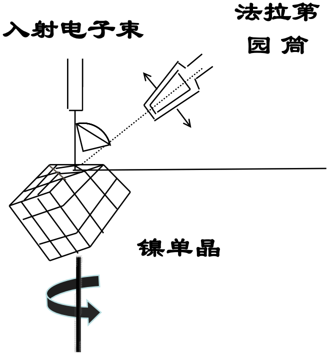
设自由粒子速度远小于光速，动能为E，则德布罗意波长为：

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} = \frac{h}{\sqrt{2meU}} \approx \frac{12.26}{\sqrt{U}} V^{\frac{1}{2}} \bullet \text{Å}$$

150V-------1**Å**；10000V---0.123**Å**，比宏观线度短，相当（或略小于）原子间距，波动性难发现。

1927年，Davisson和Germer电子衍射实验证实了德布罗意假说的正确性。

电子的双缝衍射实验同样证实了其波动性，原子、分子和中子等粒子也观察到了衍射现象，肯定了波长与动量之间的德布罗意关系。



http://you.video.sina.com.cn/b/6557641-1280066223.html

作 业

1.2
1.3
1.4