

物理类专业系列教材

量子力学

高守恩 杨建宋 编著

物理类专业系列教材

量子力学

高守恩 杨建宋 编著

清华大学出版社
北京

内 容 简 介

本书是为物理学专业与应用物理专业本科生学习量子力学课程而编写的,也可以作为理工科其他专业的学生学习量子力学的主要参考书。内容包括量子力学的实验基础、波函数与薛定谔方程、一维定态问题、量子力学的数学初步和基本假设、与时间无关问题的代数研究、中心力场、定态微扰理论、变分法、与时间有关的微扰理论——量子跃迁、几个典型应用、弹性散射、全同粒子体系。本书设定的教学学时在 70 学时左右。书中安排了一些选读内容,还安排了一定数量的习题,可以使读者更深入地掌握有关内容,并能应用量子力学解决一些实际问题。

版权所有,侵权必究。侵权举报电话:010-62782989 13701121933

图书在版编目(CIP)数据

量子力学/高守恩,杨建宋编著.--北京:清华大学出版社,2014

物理类专业系列教材

ISBN 978-7-302-35094-1

I. ①量… II. ①高…②杨… III. ①量子力学—高等学校—教材 IV. ①O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014)第 009176 号



责任编辑:邹开颜 赵从棉

封面设计:傅瑞学

责任校对:刘玉霞

责任印制:宋 林

出版发行:清华大学出版社

网 址: <http://www.tup.com.cn>, <http://www.wqbook.com>

地 址:北京清华大学学研大厦 A 座

邮 编:100084

社 总 机:010-62770175

邮 购:010-62786544

投稿与读者服务:010-62776969, c-service@tup.tsinghua.edu.cn

质 量 反 馈:010-62772015, zhiliang@tup.tsinghua.edu.cn

印 刷 者:北京富博印刷有限公司

装 订 者:北京市密云县京文制本装订厂

经 销:全国新华书店

开 本:185mm×260mm

印 张:15.5

字 数:362 千字

版 次:2014 年 5 月第 1 版

印 次:2014 年 5 月第 1 次印刷

印 数:1~2500

定 价:32.00 元

产品编号:054141-01

前 言

为解释黑体辐射的能谱问题,1900年普朗克提出了“能量子”假设,开创了研究微观世界物理理论的新纪元。随着量子力学的诞生和发展,人类对微观世界的物质运动规律的认知达到了前所未有的程度,物理学对科学技术的发展和人类文明的进步做出了重要贡献。20世纪之所以被称为物理学的世纪,相对论和量子力学起了主要作用。量子力学理论被广泛地应用到物理学的所有领域,并对其他自然科学学科的发展和生产技术领域的进步也产生了重大的影响。现代宇宙学、现代光学、量子信息学、生物遗传工程、量子化学、激光和超导等领域都在量子力学的基础上得到飞速发展。量子场论、相对论量子力学、规范场理论、量子固体理论等理论的发展与成熟,也为量子力学理论的深入发展注入了新的活力和强劲的动力。量子力学在各个科技领域取得的成就,深化了人类对微观世界的认识,极大地增强了人类对自然的支配能力,同时也成为人类处理微观世界问题最重要的理论,成为几乎所有高等学校相关专业涉及微观领域必学的一门专业基础课程。

本书的编者之一高守恩曾在安徽大学、杭州师范学院的物理学专业多次讲授量子力学课程,虽然现在国内外量子力学的教材很多,其中不乏优秀的教材,但对于师范院校的学生,真正适合学生的教材并不是很多。相比综合性大学,师范类学生由于要学习大量的教育类课程,所以在专业课学习方面就受到课时压缩的限制,学生的近代物理基础和数学基础也没有综合型大学厚实,针对这些情况,我们编写了这套讲义,并在教学中使用了多年。从使用的效果来看,它有效地解决了学生近代物理基础和数学基础不够厚实的困境,教学的深度也基本达到了综合型大学的要求,学生在大四考研时,参加量子力学这门课程的研招考试也觉得有信心。历届用过本讲义的学生,考研时在量子力学课程上的表现都不错。本书就是在该讲义基础上修编而成的。

全书共分为13章。第1章量子力学的实验基础,重点介绍量子力学起源时的诸如黑体辐射、光电效应等几个著名实验,从中可以看到“头顶上的几朵乌云”如何使得经典物理学无能为力,催生出新的微观世界的理论——量子力学成为必然。第2章波函数与薛定谔方程,内容包括波函数及其统计解释以及薛定谔方程,揭示了在微观粒子具有波粒二象性的基础上,如何用波函数来描写其状态,如何建立薛定谔方程来讨论其运动。第3章一维定态问题,这一章是用薛定谔方程来讨论几个简单的量子体系问题,包括方势阱、谐振子、 δ 函数势、自由粒子、势垒上的散射和贯穿问题。第4章量子力学的数学初步,讨论单粒子的波函数空间和表象与表象变换两个问题,目的是使读者能迅速地掌握量子力学中用到的最基本的数学工具,着眼于量子力学中一些有用的数学概念和数学运算,而略去了那些普遍定义和严格证明。第5章介绍量子力学的基本假设,内容涉及态和态的叠加原理、力学量的算符表示、测不准关系、运动方程、全同粒子体系和交换对称性。量子力学就是建立在这几个基本假设上的,虽然这些假设不能为实验所证明,但近一个世纪以来从量子力学所得的结果和实验结果很好地符合这一事实,也充分证实了这些量子力学基本假设的正确性。第6章是与时间无关问题的代数研究,从量子力学的基本假设和数学出发重新考虑线性谐振子,进而再研究一维和三维刚性转子的运动,角动量本征值的代数求解,可为讨

论转动和转动不变性以及自旋建立很好的基础。第 7 章讨论中心力场问题。在量子力学中，中心力场具有十分重要的地位。这一章首先在球坐标系中对薛定谔方程进行分离变量，进而用之讨论无限深的球势阱，讨论三维各向同性的谐振子，讨论氢原子问题和两体问题，特别是氢原子问题的量子力学求解，是对量子力学基本假设的重要验证。第 8 章定态微扰理论，讨论量子力学中一个重要的近似方法。内容涉及非简并的和简并的微扰理论，并应用于解释氢原子的一级斯塔克效应。第 9 章变分法。在微扰方法不再适用时，变分法是量子力学处理实际问题的另一个重要的近似方法。本章内容涉及变分法的基本理论以及在谐振子、氢原子和氦原子上的变分处理。第 10 章是与时间有关的微扰理论——量子跃迁，内容涉及量子跃迁和量子几率，一级含时微扰理论，几种典型微扰下的跃迁几率，关于能量与时间的测不准关系，原子对电磁辐射的吸收和发射，激光原理。第 11 章是前面几章方法的应用，在这一章中，首先讨论了规范变换，进一步讨论了粒子在均匀磁场中的运动和朗道能级、量子霍尔效应、均匀磁场中的电子自旋动力学和磁共振、角动量耦合、塞曼效应、自旋单态和三重态，本章的许多问题已经在原子物理课程中涉及，但读者在这里可以看到用量子力学的全新视野如何重新审视这些问题。第 12 章讨论弹性散射，这是可以和物理实验紧密对照的课题。将首先介绍散射界面和散射的量子力学描述，进而讨论分波法和光学定理，讨论在方势阱和方势垒上产生的散射现象。这一章还涉及低能散射，也讨论了波恩近似和金属粒子的散射问题。第 13 章讨论全同粒子体系，主要讨论了由两个全同粒子组成的系统，讨论了氢原子和氢分子问题，最后讨论了占有数空间下玻色子和费米子的二次量子化问题。

本书的讲义原稿以高守恩为主编写，杨建宋对原讲义进行了补充和修订。本书的统稿和技术加工由杨建宋完成。

本书适用的对象主要是普通高等院校和师范类院校的物理系学生和教师，可作为他们“量子力学”课程的教材或主要参考书。也可以作为理科其他专业（如化学类）学生学习量子力学或量子化学课程的主要参考书。本书的推荐学时是每周 4 学时，一个学期共 70 学时左右。本书的宗旨就是在有限的篇幅内，对量子力学有一个完整准确的描述，使读者对应用量子力学解决实际问题有一个全新的了解。在现在物理类学生硕士招生考试中，量子力学常常是一门必考的课程，本书将用严谨的主体知识结构和丰富实用的量子力学应用为读者参加研招考试提供帮助。限于编者的水平，书中肯定有不够完善之处，希望读者不吝指正。

在本书的编写和出版过程中，得到了杭州师范大学理学院的大力支持，也得到了国家自然科学基金（No. 11274084）和杭州师范大学“大学物理教学改革”、“近代物理实验精品课程建设”以及“经亨颐学院物理专业特色课程群建设”等课改项目的支持，李康教授仔细阅读了书稿，并提出了很多有益的建议，这些建议已经在书稿的修编中得到了很好的体现。在此谨向他们表示衷心的感谢。

高守恩 杨建宋

2014 年 4 月

目 录

第 1 章 量子力学的实验基础	1
1.1 黑体辐射和普朗克假设	2
1.2 爱因斯坦光量子理论, 光的波粒二象性	3
1.3 玻尔的量子理论	6
1.4 德布罗意假设, 实物粒子波粒二象性	8
1.5 量子力学的建立	10
习题	11
第 2 章 波函数与薛定谔方程	12
2.1 波函数及其统计解释	12
2.2 薛定谔方程	14
习题	21
第 3 章 一维定态问题	23
3.1 引言	23
3.2 一维方势阱, 束缚态	24
3.3 一维谐振子	30
3.4 关于束缚态的几个定理	35
3.5 δ 函数	36
3.6 引力 δ 函数势	38
3.7 自由粒子	42
3.8 一维有限高阶梯势垒上散射	44
3.9 一维方势垒贯穿——隧道效应	46
习题	49
第 4 章 量子力学的数学初步	51
4.1 单粒子的波函数空间	51
4.2 表象和表象变换	62
习题	71
第 5 章 量子力学的基本假设	75
5.1 态及态的叠加原理	75
5.2 力学量的算符表示	76
5.3 测不准关系	79
5.4 运动方程	81

5.5 全同性粒子体系和交换对称性	84
习题	89
第 6 章 与时间无关问题的代数研究	92
6.1 线性谐振子	92
6.2 费曼-海尔曼定理	96
6.3 刚性转子	100
6.4 角动量代数研究	103
6.5 转动和转动不变性	107
6.6 自旋的角动量	108
习题	112
第 7 章 中心力场	115
7.1 径向薛定谔方程	115
7.2 无限深的球形势阱	117
7.3 三维各向同性谐振子	118
7.4 氢原子	120
7.5 两体问题	126
习题	129
第 8 章 定态微扰理论	131
8.1 非简并态微扰理论	131
8.2 简并态微扰理论	136
8.3 氢原子的一级斯塔克效应	139
习题	141
第 9 章 变分法	144
9.1 变分原理	144
9.2 谐振子、氢原子和氦原子的变分处理	145
习题	149
第 10 章 与时间有关的微扰理论——量子跃迁	151
10.1 量子跃迁和跃迁几率	151
10.2 一级微扰理论	152
10.3 几种典型微扰下的跃迁几率	155
10.4 关于能量-时间测不准关系	158
10.5 原子对电磁辐射的吸收和发射	159
10.6 激光原理	165
习题	167

第 11 章 几个典型的应用.....	169
11.1 规范变换	169
11.2 粒子在均匀磁场中运动——朗道能级.....	171
11.3 量子霍尔效应	172
11.4 均匀磁场中的电子自旋动力学, 磁共振.....	174
11.5 角动量相加	177
11.6 塞曼效应	180
11.7 自旋单态和三重态	184
习题	187
第 12 章 弹性散射	190
12.1 散射截面	190
12.2 散射的量子力学描述	191
12.3 分波法	192
12.4 光学定理	196
12.5 方势阱和方势垒所产生的散射	196
12.6 低能散射	197
12.7 玻恩近似	200
12.8 金属粒子的散射	204
习题	205
第 13 章 全同粒子体系	208
13.1 两个全同粒子体系	208
13.2 氢原子	209
13.3 氢分子	213
13.4 占有数空间和玻色子的二次量子化	216
13.5 占有数空间和费米子的二次量子化	218
习题	220
习题答案	222
参考文献	237

第 1 章 量子力学的实验基础

19 世纪末 20 世纪初，随着生产和科学实验的发展，人类的认识从宏观领域进入到微观领域（原子和亚原子尺度上）的新阶段。量子力学和其他科学一样，它的诞生是人类智慧的结晶。

量子力学是研究微观粒子现象及其运动规律的理论。对自然现象的描述和理解而言，量子力学可以说是非常基础的。事实上，很多自然现象发生在十分微小的尺度上，因此，只有在量子物理学的范围内，这些现象才能得到解决。例如，原子的存在和性质，化学键，电子在晶体中的运动等，即使是宏观物理客体（它的大小与日常生活中所见的物体大小可以比拟）从经典物理学来看都是不可理解的。从原则上说，也应当从研究客体内部原子、离子及电子的行为着手，才有可能全面地、科学地描述它们。正是在这个意义上，可以说量子力学是现阶段我们理解各种自然现象的基础。此外，已经证实，在宏观尺度上，明显地表现出量子行为的宏观现象（如超导、超流等）也是很多的。从历史的观点来看，19 世纪末，从各种物理现象中，人们已经认识到物质有两种客体：一是实物，二是辐射。而且掌握了关于这两类客体的完全不同的规律，为了预言物体的运动、人们应用牛顿力学；关于辐射，建立了麦克斯韦方程组，电磁理论使人们对原先属于不同领域的如电学、磁学和光学中的大量的现象得到了一个统一的理解；特别是辐射的电磁理论，由于赫兹发现电磁波而得到了出色的实验证实，最后根据洛伦兹力可得到对辐射与物质相互作用的令人满意的解释，这些物理规律能阐明经常遇到的一些现象，所以当时有些物理学家错误地把经典物理学理论看作物理学的“最终理论”。但是，刚跨入 20 世纪物理学就受到了两大突破，导致了相对论和量子力学的出现。相对论和量子论的出现，在很大程度上是彼此无关的，因为这两种理论是从不同的角度来怀疑经典物理学的：对运动速度高到可以与光速相比拟的物体而言，经典的规律不再有效（这属于相对论领域）；其次，在原子和亚原子尺度上，经典规律也不成立（属于量子论领域）。然而我们必须注意到，在这两种情况下，经典理论都表现为新的量子理论的极限情况。例如，当一个物体的速度远小于光速，而且线度大于原子的线度，牛顿力学就可以预见它的运动。但是，从根本上讲，量子论总是必不可少的。例如，只有量子论才能使我们理解固体的存在以及与之相关的各种宏观参数大小（如密度、比定容热容、弹性等）。本书不讨论高速微观现象，只讨论低速微观现象，就是说我们只研究非相对论性量子力学，因为大部分的原子现象和分子现象都可以用它来解释。

本章讨论量子力学的实验基础，说明量子力学是在尝试解决经典物理学与一些实验结果之间的矛盾过程中诞生的，因此首先讨论用经典物理学理论解释一些实验结果时遇到的困难。这些困难大致分为两类：一类是研究黑体热辐射性质开始的关于光的本性的问题；另一类是关于卢瑟福的原子核式结构模型产生的一些理论问题。在解决这些困难过程中，一些物理学家提出的一些革命性的思想和观念，以及讨论问题的方法，其核心思想是能量的不连续性和电磁辐射与实物粒子都具有波粒二象性，它们是建立和理解量子力学的基础。下面我们来讨论这些问题。

1.1 黑体辐射和普朗克假设

19 世纪末和 20 世纪初, 物理学家遇到的一个重要而且不能解决的问题就是黑体辐射。众所周知, 辐射是一定波长范围内的电磁波。所有的物体都能发出辐射, 也能吸收和反射外来的辐射。如果一个物体能完全吸收投射在它上面的辐射而不反射, 则这样的物体称为绝对黑体 (简称黑体)。例如, 开有小孔而完全不导热且保持一定温度的空腔 (如图 1-1 所示) 可以近似地看作黑体, 因为投射到小孔上的外部光线实际上进入空腔内不能返回, 就是说, 被完全吸收了。当空腔壁与腔内的辐射处于热平衡时, 腔内单位面积发射出来的辐射能量密度按频率分布曲线形状和位置如图 1-2 所示, 仅与黑体的热力学温度有关, 与空腔的形状和组成腔壁的物质性质无关。

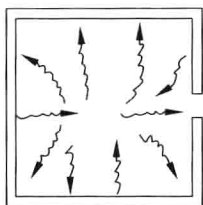


图 1-1 视为黑体的空腔

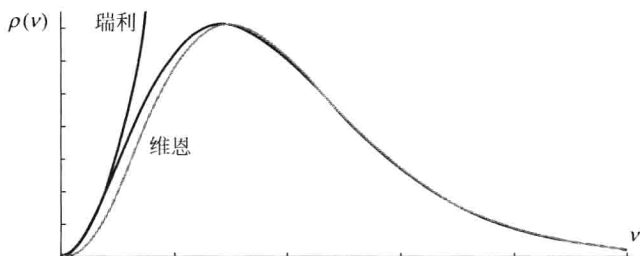


图 1-2 黑体辐射能量密度按频率分布曲线 ($T=1595\text{K}$)

当时有许多物理学家试图从经典物理学规律来推出黑体辐射能谱的分布规律, 结果都失败了。

1896 年德国物理学家维恩 (Wien) 用热力学观点来处理, 得出了下面半经验的能量密度分布公式:

$$\rho(\nu)d\nu = c_1 \nu^3 e^{-c_2 \nu/T} d\nu \quad (1-1)$$

式中, c_1 、 c_2 是两个经验常数; T 是热力学温度。式 (1-1) 称为维恩公式, 它与实验曲线比较, 仅仅在高频部分符合, 低频部分相差甚大。美国物理学家瑞利 (Rayleigh) 利用统计力学和经典电磁理论于 1900 年推出了另一个辐射能量密度按频率分布公式, 后来美国物理学家金斯 (Jeans) 对它作了修改, 成为

$$\rho(\nu)d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} kT d\nu \quad (1-2)$$

人们称其为瑞利-金斯公式。式中 k 为玻耳兹曼 (Boltzmann) 常数。该公式与实验结果比较, 与维恩公式相反, 它在低频部分与实验结果符合得很好, 而在高频部分明显与事实不符, 如果用式 (1-2) 来计算总的辐射能量 u , 就得到发散的积分:

$$u = \int_0^\infty \rho(\nu) d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \int_0^\infty \nu^2 d\nu = \infty$$

显然与客观事实不符。这种情况被艾仑菲斯 (Ehrenfest) 称为“紫外灾难”。由此可见, 经典物理学不能给出黑体辐射问题上令人满意的解释, 暗示着物理学面临着严重的危机。

普朗克 (Planck) 为了克服“紫外灾难”, 在 1900 年提出了一个很重要的假设, 解决了这个问题。他的假设是: 把空腔的腔壁看作是由大量的带电振子组成的, 每个振子都有特

征的振动频率 ν 。这些振子和辐射之间发生能量交换时,只能取分立的能量值,即频率为 ν 的振子在腔内发射辐射能量时,只能取能量最小值 $\varepsilon = h\nu$ 的整数倍:

$$E = nh\nu, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1-3)$$

这个能量最小单元称为能量子或简称量子,实验上确定

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$$

具有作用量的量纲,现称它为普朗克常数,它在整个近代物理学中起着基础的作用,普朗克的能量-频率关系式 (1-3) 在物理学中完全是一个新的革命性的关系式。基于这个假设,普朗克采用统计方法得到谐振子的平均能量为

$$\bar{\varepsilon}(\nu) = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1-4)$$

而不是

$$\bar{\varepsilon}(\nu) = kT$$

从而导出了黑体辐射公式

$$\rho(\nu) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (1-5)$$

式中 k 为玻耳兹曼常数。这就是著名的普朗克黑体辐射公式,它与实验符合得很好。在高频 ($h\nu/kT \gg 1$) 时,可得维恩公式(1-1);在低频 ($h\nu/kT \ll 1$) 时,可得瑞利-金斯公式(1-2)。

普朗克的假设与经典概念根本对立。按经典物理学,能量和其他物理量一样,是连续变化的,普朗克认为对于一定频率 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,物体在吸收或发射辐射的过程中,呈现出能量的分立性。物理学中引入了这一新的而且深奥的概念,从此突破了经典物理学对微观领域的束缚,为认识光的本性开辟了道路,由于普朗克做出了这一划时代的贡献,他获得了 1918 年度的诺贝尔物理学奖。

1.2 爱因斯坦光量子理论,光的波粒二象性

1. 光电效应

一定频率 ν 的光照射到清洁的金属表面时,会在其表面上发射出电子,这一现象是 1887 年由赫兹 (Hertz) 发现的,现称为光电效应。

研究光电效应实验如图 1-3 所示。

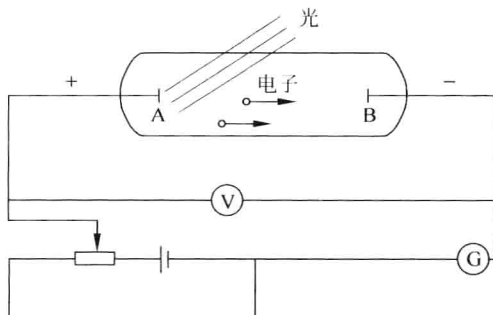


图 1-3 光电效应实验示意图

一定光照到金属表面 A 时, 金属表面就释放出电子, 称为光电子。当 AB 间加上的遏止电压增加到 V_C 时, 电流计中电流为零, 可以将观察到的一些实验结果归纳如下。

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

(2) 光电子的能量随着照射光的频率线性地增加, 而与光的强度无关。

(3) 对于一定频率 ν 的光, 光电流正比于光的强度, 也就是说光的强度只影响光电子的数目, 不影响光电子的能量。

(4) 光的强度低于 10^{-10}W/m^2 , 光电流达到稳定状态的滞后时间小于 10^{-9}s , 就是说光电效应是瞬时的。

如果说单位时间内逸出的光电子数 (光电流) 随着光强 I 增加而增加可以理解的话, 那么光电子的最大初动能不依赖于光强, 却仅线性依赖于频率, 以及没有明显的时间延迟, 这两种现象则完全不是所期望的, 而且也是无法用经典理论可以解释的。这是因为:

(1) 按照经典电磁波理论, 光的强度与光波的电场强度振幅成平方关系, 即 $I \propto E^2$ 。作用在金属表面内电子上的力与场强 E 成正比。因此, 光强越强, E 越大, 在相同时间内电子获得的能量也越大, 那么逸出金属后的电子的初动能也应该越大。从这个角度讲, 光电子的最大初动能应该与入射光的光强密切相关, 而不应该与入射频率有关, 但实验事实并非如此。

此外, 经典电磁波理论告诉我们, 光波是连续传播的, 金属中的电子会连续不断地从入射光波中吸取能量。因此, 只要入射光的强度足够, 经历的时间足够长, 电子总可以吸收足够的能量来克服逸出金属表面所需要的能量, 从而有光电子逸出, 形成光电流。但事实并非如此, 光电效应中存在一个极限频率, 称为红限频率。一旦低于红限频率, 即使光强再强, 照射时间再长, 也不会观察到光电效应。

(2) 按照经典电磁波理论, 电子要从金属表面逸出, 必须从入射光波中吸收能量, 并且积累到一定程度。因此, 对于光强很弱的光波, 电子需要经历很长一段时间从光波中吸收能量并累积。但实验事实告诉我们, 只要入射光的频率大于某一频率, 光一照, 电子立刻会从金属表面逸出, 形成光电流, 不存在明显的时间延迟。

2. 爱因斯坦的光子理论

爱因斯坦认为, 麦克斯韦电磁波理论在描述光在整个空间中的传播是成功的, 但是在涉及光与物质的“瞬时”相互作用时, 也许需要新的理论。他在普朗克能量量子化的基础上进一步指出, 电磁辐射的能量在空间传播时也是一份一份的, 而不仅仅限于黑体腔壁谐振子的能量发射和吸收。这种光的能量并非是均匀分布在波峰上的, 而是局限在某些区域, 称为光量子, 并且每一个光量子携带的能量是

$$E = h\nu \quad (1-6)$$

按照这个理论, 光子也将具有动量

$$p = \frac{E}{c} = h \frac{\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (1-7)$$

式中, λ 是光的波长。

爱因斯坦在其 1905 年的论文中这样解释光电效应: 最简单的方法就是假想将一个光子的全部能量给予一个电子。电子吸收能量后, 一部分用来克服金属表面阻力所需的逸出功, 另一部分能量成为逸出表面后电子具有的最大初动能。

因此, 依据爱因斯坦的光子理论, 有

$$E_{\text{kmax}} = h\nu - W \quad (1-8)$$

式中, W 为逸出功, 是电子束缚在金属中的最小能量。上述方程称为爱因斯坦光电方程。

爱因斯坦光电方程可以很好地解释光电效应中的红限频率的问题。要使得光电效应发生, 一个极限的情况是

$$E_{\text{kmax}} = 0 \quad \text{即} \quad h\nu_0 - W = 0$$

由此可以得到极限频率为

$$\nu_0 = W / h \quad (1-9)$$

当照射光的频率 $\nu < \nu_0$ 时, 不具有足够的能量来逸出一个电子, 因此没有办法观察到光电效应。

根据爱因斯坦的光子理论, 光照射到金属表面时, 电子吸收能量是一次性的, 光电子的逸出是瞬时的, 因而不需要时间积累, 没有明显的时间效应。此外, 至于光电流和光强的关系也可作如下解释: 光强越强, 光子数就越多, 那么单位时间内光子与电子的相互作用的数目也就增多, 所以从表面逸出的光电子数目也就增加, 因此饱和电流将与光强成正比。

爱因斯坦从理论上成功地解释了光电效应, 其实质是爱因斯坦对光的本性认识提出了划时代的见解。他认为光既有波动性, 又有粒子性, 是具有两种性质的矛盾的统一体。爱因斯坦关系式 (1-6) 和式 (1-7) 正好反映了它们的联系和统一, 因此爱因斯坦获得了 1921 年诺贝尔物理学奖。

3. 康普顿效应

光电效应揭示了光的粒子性, 并在 1923 年的康普顿 (Compton) 散射实验中得到了进一步证实。

1923 年康普顿发现高频的 X 射线被较轻元素中的电子散射后, 散射波长随着散射角 θ 增大而增大, 这种现象称为康普顿效应。然而经典物理学也是无法解释这种现象的, 因为按照经典电磁理论, 入射的电磁波引起电子的受迫振动, 振动着的电子又发射球面次波, 次波就是散射波; 因此散射波长和入射波长是相等的。按光量子理论, 康普顿把这种现象看作是 X 射线中的光子与轻元素中的电子发生弹性碰撞而形成的, 如图 1-4 所示。并假定在散射过程中, 能量和动量守恒定律是成立的。由此可以圆满地解释康普顿效应。由于碰撞前电子的速度比反冲电子速度小很多, 可以把前者看作静止; 电子在原子中的束缚能, 相对于 X 射线中的光子能量也小很多, 可以把碰撞前的电子近似看作为自由电子。在这些近似下, 由能量和动量守恒定律可得

$$h\nu + mc^2 = h\nu' + E'_e \quad (1-10)$$

$$\mathbf{p} - \mathbf{p}' = \mathbf{p}'_e \quad (1-11)$$

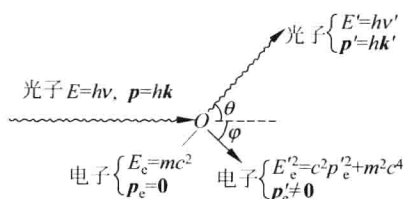


图 1-4 康普顿效应

利用公式

$$E_e'^2 = c^2 p_e'^2 + m^2 c^4$$

可得

$$\frac{(h\nu + mc^2 - h\nu')^2}{c^2} - (p - p')^2 = m^2 c^2 \quad (1-12)$$

由于光子 $p = \frac{h\nu}{c}$, $p' = \frac{h\nu'}{c}$, 则有

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}' = pp' \cos \theta = \frac{h^2 \nu \nu'}{c^2} \cos \theta$$

代入式(1-12)得

$$\frac{1}{\nu'} = \frac{1}{\nu} \left[1 + \frac{h\nu}{mc^2} (1 - \cos \theta) \right]$$

利用公式 $\lambda = c/\nu$, $\lambda' = c/\nu'$, 上式可写成

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{mc} (1 - \cos \theta) = \lambda + \lambda_c (1 - \cos \theta) \quad (1-13)$$

式中 $\lambda_c = \frac{h}{mc} = 2.43 \times 10^{-3} \text{ nm}$, 称为电子的康普顿波长, 所以波长的增量为

$$\Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c (1 - \cos \theta) \quad (1-14)$$

由式(1-13)清楚地看出, 散射波长随 θ 角增大而增大的, 理论预言与实验结果符合得很好, 值得注意的是, 波长的移动 $\Delta \lambda$ 与入射辐射波长无关。由此可见, 康普顿效应证实了光量子的存在, 也就证明了爱因斯坦关系式(1-6)和式(1-7)的正确性, 同时证明了在微观领域内, 单粒子给出的能量和动量守恒定律都成立。由于这些成果, 康普顿获得了 1927 年度的诺贝尔奖。

普朗克和爱因斯坦的量子理论揭示出光的粒子性, 使人类对光的本性认识又前进了一步, 但这并不是回到了牛顿关于光的完全粒子说。同样, 也并不否定由于衍射和干涉实验证明的关于光的波动说。光具有波动和微粒双重性质, 这种性质称为光的波粒二象性。

1.3 玻尔的量子理论

关于原子的结构问题是经典物理学理论遇到困难的一个典型问题, 主要是原子的稳定性和线状光谱无法说明。

1911 年卢瑟福(Rutherford)根据盖革和马斯顿的 α 粒子散射实验的结果, 提出了原子的有核模型, 原子由质量很大的带正电荷的核(半径约 10^{-14} m)和离核较远(半径为 10^{-10} m)绕核轨道运动带负电的电子组成。根据这个模型得到的 α 粒子散射公式与实验结果完全相同。但是这个有核模型同经典物理学理论是格格不入的, 因为卢瑟福的原子有核模型中电子绕核运动是加速运动, 按经典电磁理论作加速运动的带电粒子将不断地辐射能量, 由于能量不断地减少, 使得电子的轨道不再是闭合的椭圆, 电子将沿着螺旋线越来越靠近原子核直至落到原子核上(有人计算过, 按麦克斯韦电磁理论, 在距核半径为 10^{-10} m 的轨道上运动时, 电

子收缩到原子核上只需 10^{-10}s), 这样原子就“崩溃”了, 与现实世界原子的稳定性相矛盾。其次, 按照经典电动力学, 作匀速圆周运动的电子, 辐射出电磁波的频率应当等于它作圆周运动的频率, 由于电子绕核运动, 它的能量不断向外辐射而减小, 因此, 绕核运动的轨道半径随之减小, 它的轨道角频率连续增加, 这样, 原子光谱应为连续光谱。但是实验上观察到原子光谱是线状光谱, 1885 年瑞士的物理学家巴尔末(Balmer)发现氢原子可见光谱系中的谱线波数 $\tilde{\nu} = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$ 具有下列规律:

$$\tilde{\nu} = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, \dots \quad (1-15a)$$

式中 R_{H} 称为里德伯 (Rydberg) 常数。里德伯将其进一步推广为

$$\tilde{\nu} = R_{\text{H}} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n > m = 1, 2, 3, \dots \quad (1-15b)$$

基于这些矛盾, 正在卢瑟福实验室工作的丹麦物理学家玻尔 (Bohr) 确信卢瑟福有核模型的正确性, 认识到经典电动力学不适合描述原子现象, 必须建立新的原子结构理论。1913 年玻尔把能量不连续的概念应用于解释原子的结构问题, 提出如下的假设:

(1) 定态假设。原子只存在于一定的确定状态中, 电子处在这些状态中既不能辐射也不吸收电磁波, 故这些稳定状态称为定态。处于定态中的原子有确定的能量, 它们的数值是分立的, 最低能量状态称为基态, 其余状态称为激发态。

(2) 跃迁假设。玻尔采用普朗克规律形式

$$h\nu = E_m - E_n \quad (1-16)$$

式中 E_m 、 E_n 是与定态相联系的能量。他进一步假定了从一个状态跃迁进另一个状态, 原子能量就将发生改变, 这样, 就可以解释辐射的吸收和辐射的发射的分立谱。

如果 $E_m > E_n$, 出现辐射;

如果 $E_m < E_n$, 出现吸收。

这立刻也给出了里德伯-利兹 (Rydberg-Ritz) 的并合原理:

$$\tilde{\nu} = A_n - A_m \quad (1-17)$$

式中 A_m 、 A_n 称光谱项, 这样, A_m 与 $-E_m/hc$ 相一致, 才弄清楚了光谱项的物理实质。

(3) 量子化条件。氢原子定态下电子的轨道角动量 L 等于 $\hbar$ 的整数倍, 即

$$L = n\hbar, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1-18)$$

的状态。这里 $\hbar = h/2\pi$, 与角动量为 $n\hbar$ 的状态对应的氢原子第 n 个定态的能量值为

$$E_n = - \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu e^4}{2\hbar^2 n^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1-19)$$

式中 $\mu = \frac{Mm}{m+M}$ 称折合质量, M 为质子质量, m 为电子质量, n 为主量子数。玻尔理论成功地解释了原子的稳定性和光谱线系的规律性。由式 (1-19), 从理论上推得里德伯常数

$$R_{\text{H}} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{\mu e^4}{4\pi\hbar^3 c} \quad (1-20)$$

计算值与实验值很好地符合。而且原子能级的不连续性于 1914 年由弗兰克(Franck)和赫兹从实验上加以证实,这样就建立了原子结构的量子理论,是原子物理学上重大的发展,是原子物理学上划时代的创举,它为量子力学的建立奠定了基础。为了表彰玻尔的功绩,1922 年授予他诺贝尔物理学奖,1925 年弗兰克和赫兹因做了证实原子能量不连续性的实验也获得了诺贝尔物理学奖。

玻尔量子理论虽然有成功的一面,但也存在着不可克服的困难。例如,把玻尔理论应用于氢原子时,理论结果与实验不符,即使是氢原子,这个理论也仅给出光谱线的频率,而不能给出光谱线的强度。量子化条件也带有人为的痕迹,这个理论所以存在着缺陷,主要是把微观粒子看作经典力学中的质点,并把经典物理学的规律应用在它上面。由此可见,玻尔量子理论是一种半经典半量子的混合理论,所以不能揭示出微观粒子运动的本质。但同时,这理论也引导和启发人们去找寻更完美的理论,我们将看到,在解决矛盾的过程中,逐步建立起了量子力学。

1.4 德布罗意假设,实物粒子波粒二象性

1. 德布罗意假设

在光的波粒二象性的启示下,法国物理学家德布罗意(De Broglie)根据经典质点力学和几何光学的相似性,提出了实物粒子(指静质量不为零的微观粒子)也具有波动性。他认为 19 世纪对光的研究只侧重于光的波动性,而忽略了光的粒子性,而对实物粒子的研究可能发生相反的情况,侧重其粒子性的研究,而忽略了波动性。如果我们建立既能解释光的性质又能说明实物粒子性质的单一理论,那么在实物粒子理论中,就像在电磁辐射理论中一样,普朗克-爱因斯坦关系式(1-6)和式(1-7)可推广到实物粒子,首先是电子。就是说这种波粒二象性,不仅是光具有的性质,也应该是电子和其他实物粒子具有的性质。他把与实物粒子相联系的波称为物质波。

按照德布罗意假设,粒子的能量 E 、动量 p 与相应的物质波的频率 ν 和波长 λ 之间的关系分别为

$$\nu = E/h \quad (1-21)$$

$$\lambda = h/p \quad (1-22)$$

这称为德布罗意关系式,形式上是普朗克-爱因斯坦关系式(1-6)和式(1-7)的倒转,在概念上是不相同的。普朗克-爱因斯坦关系式表明辐射具有粒子性,而德布罗德关系式表明粒子具有波动性。德布罗意关系式可以看作普朗克-爱因斯坦关系式的推广,它既可反映光子的波粒二象性,也可反映实物粒子的波粒二象性。

让我们考虑动量为 p 、能量为 E 的自由粒子,当它的速度远小于光速时,其能量为

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (1-23)$$

则粒子相联系的物质波的波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}} \quad (1-24)$$

例如, 一个由电势差 V 加速的电子, 其能量为 $E = eV$ 电子伏特, 将 e 、 m 、 h 的值代入式(1-24)中, 则得到该电子的德布罗意波长为

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2meV}} = \sqrt{\frac{150}{V}} = \frac{12.25}{\sqrt{V}} (\text{\AA}) \quad (1-25)$$

由此可见, 在通常情况下, 电子的德布罗意波长是很短的。例如动能为 150eV 的电子的德布罗意波长为 $1\text{\AA}$ 。可见, 能量不算高的电子的德布罗意波长相当短, 可与 X 射线的波长相比拟, 宏观粒子, 例如布朗粒子 ($m = 10^{-12}\text{g}$, $v = 1\text{cm/s}$, $\lambda = 6.6 \times 10^{-7}\text{\AA}$)、枪弹 ($m = 20\text{g}$, $v = 500\text{m/s}$, $\lambda = 6.6 \times 10^{-23}\text{\AA}$) 等的波长更短, 它的波动性是无法观测到的。

2. 戴维孙和革末的电子衍射实验

德布罗意关于实物粒子具有波动性的假设是否正确, 有待于实验上的检验。在历史上最清楚地证明实物粒子具有波动性的第一个实验, 由美国物理学家戴维孙 (Davisson) 和革末 (Germer) 在 1927 年所完成。他们用一定能量的电子垂直地射向光滑的镍单晶表面上, 观察、测量反射电子束的强度与反射角之间的关系, 观测结果与 X 射线有相似的衍射现象。他们使用的实验装置如图 1-5 所示, 从电子枪射出的是能量为 54eV 的电子束, 垂直射到镍单晶面上, 在不同的角度上测量反射电子流, 反射出的电子表现出明显的方向性, 在 $\theta = 50^\circ$ 的方向上, 测量到电子数目最多, 类似于 X 射线在晶体表面反射时所产生的衍射。这只能用电子具有波动性来解释。根据衍射理论, 衍射极大值的 θ 角由公式

$$n\lambda = d \sin \theta, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-26)$$

表示, 式中 λ 为入射波的波长, d 为晶格常数, $d = 2.15\text{\AA}$ 。 $\theta = 50^\circ$ 角方向中出现极大值, 相当于 $n = 1$ 。由式(1-26)算出电子波长的实验值 $\lambda_{\text{实}} = 1.66\text{\AA}$, 这与德布罗意关系式(1-25)算出的电子波长的理论值为 $\lambda_{\text{理}} = 1.66\text{\AA}$ 相比, 理论值与实验值符合得很好, 则就证明了德布罗意关系式(1-22)的正确性, 也就证实了电子具有波动性。

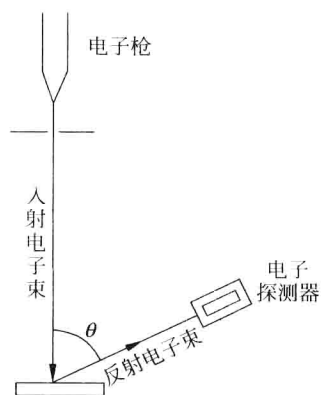


图 1-5 电子衍射实验

与此同时, 汤姆逊将电子束通过金、铂、铅等薄膜, 在荧光屏上观察到衍射图样, 如图 1-6 所示。也证实了德布罗意关系式的正确性, 因此德布罗意在 1929 年获得了诺贝尔物理学奖, 戴维孙、汤姆逊获得 1937 年的诺贝尔物理学奖。

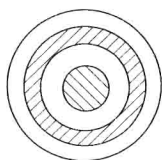


图 1-6 电子通过金属薄膜的衍射图

后来又有许多实验证实了粒子的波动性, 不仅电子, 而且用其他实物粒子如质子、中子、原子和分子来做衍射实验, 都证实了它们也具有波动性, 因此说波动性是一切微观粒