

高等学校教学参考书

# 结构化学计算

游效曾 编

人民教育出版社

高等学校教学参考书

# 结构化学计算

游效曾编

人民教育出版社

## 内 容 简 介

本书选编了关于“结构化学”方面的计算例题 200 多个, 共分为量子力学基础、原子结构、分子结构、晶体结构、结构和性质、以及结构分析方法等六个部分。

本书可以作为高等学校有关“结构化学”方面课程的教学参考书, 也可供对“结构化学”方面有兴趣的化学工作者的自学参考读物。

高等学校教学参考书

结构化学计算

游效曾 编

\*

人民教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

人民教育出版社印刷厂印装

\*

开本 787×1092 1/32 印张 10.625 插页 1 字数 257,000

1979年4月第1版 1981年11月第2次印刷

印数 46,001—52,000

书号 13012·0347 定价 0.78 元

# 序 言

近代化学的特点之一是研究化合物的微观结构，高等学校开设的“结构化学”课程，反映了这方面的需要。从实际的教学情况着眼，在学习中的主要的困难来自两个方面。一方面，在有关量子化学的基础理论中会碰到很多新的概念和较复杂的计算方法，如果不通过较具体的计算，很难理解这么抽象的数理演绎怎么会导致如此实际的结果。另一方面，在有关结构分析方法中，由于条件关系不一定每个人都能进行实验，而如果不对数据进行处理分析就很难获得应有的结论。编写这本参考书的目的就是企图通过一些计算例题来部分弥补这方面的不足。

选编的例题以配合我国“结构化学”基础教科书为主，但将略为超过一般教学内容。其中包括较为浅近的数值计算、公式的正确运用、常用而被省略的数学推导和理论在实际问题中的应用等实例。对于化学工作者来说，可能还必须对数学结论赋予可以理解的分析说明。书中所引用的公式，由于在一般基础课本中都可以找到，将不再加以证明。为此，我们建议初学者配合书后所列参考资料[1—5]进行阅读。

本书可以作为高等学校有关“结构化学”课程的教学参考书，也可供对结构化学理论、结构和性质、以及结构实验方法有兴趣的化学工作者自学参考读物。

由于笔者水平有限，虽属移花接木，但也难免弄巧成拙，错误之处，希同志们加以批评指正。

游效曾于南京大学

一九七八年十月

# 目 录

第一章	量子力学基础	1
第二章	原子结构	43
第三章	分子结构	91
第四章	晶体结构	155
第五章	结构和性质	212
第六章	结构分析方法	260
附 录		314
一、	希腊字母和符号	314
二、	国际单位制	315
三、	基本物理常数和能量单位的换算	318
四、	某些数学公式	320
五、	拉普拉斯算符及空间微体积的球坐标形式	322
六、	定态微扰理论	325
七、	CNDO/2 方案的电子计算机演习	328
八、	主要参考书	334

# 第一章 量子力学基础

## 内容提要

量子力学是研究化学结构、结构和性质、以及进行结构测定的理论基础。本章通过黑体辐射、质能联系定律、光电效应、电子衍射和测不准关系等实例介绍了量子论和微观粒子二象性概念。以自由电子、一维势阱和谐振子为重点,说明如何在合理解的条件下运用薛定谔方程求解。最后介绍了常用的变分法和微扰法的一些简单实例。

1-1 普朗克于1900年从辐射能量的不连续性假定出发推导出黑体辐射公式,即辐射能力

$$E_{\lambda} = \frac{2\pi c^2 h \lambda^{-5}}{e^{hc/\lambda kT} - 1} \quad (1)$$

从而开创了量子理论。试计算①在波长 $\lambda = 4.002$ 微米和温度 $T = 634^{\circ}\text{K}$ 时的 $E_{\lambda}$ 值,②在 $T = 2000^{\circ}\text{K}$ 和 $6000^{\circ}\text{K}$ 时对应于辐射能力最大的波长 $\lambda_m$ 。

解: ①以 $\lambda = 4.002$ 微米, $T = 634^{\circ}\text{K}$ 代入(1)式得到\*

$$E_{\lambda} = \frac{2 \times 3.142 \times (2.998)^2 \times 6.626 \times 10^{13}}{\frac{2.998 \times 6.626 \times 10}{(e^{1.380 \times 4.002 \times 6.34} - 1)} \times 4.002^5}$$

$$= 1.26 \times 10^{10} \text{ 尔格/秒} \cdot \text{厘米}^3 = 1.26 \text{ 千瓦/厘米}^3$$

和实验值 $1.27 \text{ 千瓦/厘米}^3$ 相当符合。

\* 所用常数及单位参考附录二和三。

② 公式(1)具有图 1-1 的形式, 为求在固定温度  $T$  时的最大波长  $\lambda_m$ , 令  $x = \frac{hc}{\lambda kT}$ , 则(1)式化为

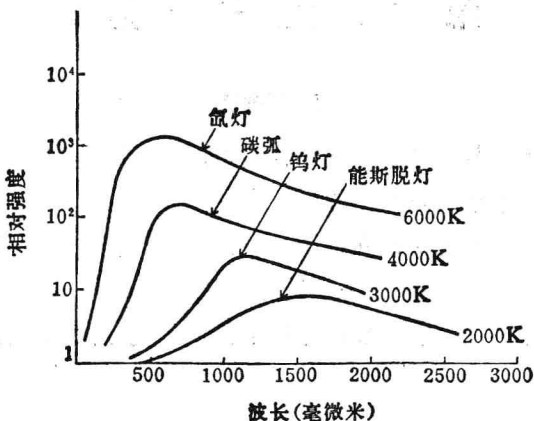


图 1-1 黑体辐射曲线

$$E_{\lambda} = f(x) = \frac{2\pi k^5 T^5}{c^3 h^4} \frac{x^5}{e^x - 1} \quad (2)$$

为求函数  $f(x)$  的极大值, 对上式微分并令其等于零

$$f'(x) = \frac{2\pi k^5 T^5}{c^3 h^4} \frac{5x^4(e^x - 1) - x^5 e^x}{(e^x - 1)^2} = 0$$

不考虑  $x=0$  的情况就得到

$$5e^x - xe^x - 5 = 0$$

用图解法求解这个超越函数得到  $x = 4.9650$ , 因此

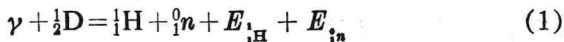
$$\lambda_m = \frac{hc}{4.9650kT} \quad (3)$$

将  $T = 2000^\circ\text{K}$  代入(3)式得到  $\lambda_m = 1.45$  微米

将  $T = 6000^\circ\text{K}$  代入(3)式得到  $\lambda_m = 0.483$  微米

和图中对应曲线的极大值是一致的。实际上, 能斯脱棒常用来作为波长较长的红外光源, 氘灯常用作波长较短的紫外光源。

1-2 当用能量为 2.623 兆电子伏的硬  $\gamma$  光子和重氢  ${}^2_1\text{D}$  的核相互作用时得到质子和中子, 即发生下列核反应



其中元素的左上方为原子序数或核电荷、左下方为同位素质量。结果得到质子的动能  $E_{{}^1_1\text{H}} = 0.2168$  兆电子伏, 其中  $E_{{}^0_1n}$  为中子的动能。若已知氢同位素核的质量为:  ${}^1_1\text{H} = 1.67268 \times 10^{-24}$  克/原子;  ${}^2_1\text{D} = 3.34369 \times 10^{-24}$  克/原子, 试求中子的质量。

解: 由于质子和中子的质量相差不多, 可以假设产生的质子和中子的能量实际上相同, 因此

$$\gamma + {}^2_1\text{D} = {}^1_1\text{H} + {}^0_1n + 2E_{{}^1_1\text{H}} \quad (1)$$

移项后得到中子的质量

$${}^0_1n = \gamma + {}^2_1\text{D} - {}^1_1\text{H} - 2E_{{}^1_1\text{H}} \quad (2)$$

将同位素  ${}^2_1\text{D}$  和  ${}^1_1\text{H}$  的值代入上式, 并将实验的光子和质子的动能数值按下列爱因斯坦质能关系转化为质量单位

$$m = \frac{E}{c^2} \quad (3)$$

其中  $m$  为质量,  $c$  为光速,  $E$  为能量(尔格)。代入(2)式后得到

$$\begin{aligned} {}^0_1n &= (3.34369 + 0.00468 - 1.67268 - 2 \times 0.00039) \times 10^{-24} \text{克/原子} \\ &= 1.67492 \times 10^{-24} \text{克/原子} \end{aligned}$$

而按质量的物理标度(即以  ${}^{16}_8\text{O} = 16.0000$  为质量标准), 中子的质量为

$$\begin{aligned} {}^0_1n &= 1.67492 \times 10^{-24} \text{克/原子} \times 6.0249 \times 10^{23} \text{原子/(克原子)} \\ &= 1.00912 \text{克/(克原子)} \end{aligned}$$

(3) 式所表达的质能联系定律表明了物质和运动密切相关的辩证关系, 本题的计算也表明了该式的一个应用。

1-3 自然存在的元素钾有 0.0118% 为放射性同位素  ${}^{40}_{19}\text{K}_{21}$ ,



其中右下角为中子数。它在 $\beta$ 衰变时



测出发射电子( $\beta$ 射线)的动能为1.32兆电子伏。由质谱法测出 ${}_{20}^{40}\text{Ca}$ (它很稳定,并且在自然钙中的含量为97%)的质量为39.96259道尔顿,试求 ${}_{10}^{40}\text{K}$ 的质量。

解:忽略反应 $\text{Ca}^{+} + e^{-} \longrightarrow \text{Ca}$ (6电子伏)的能量。因此在反应 ${}_{10}^{40}\text{K} \longrightarrow {}_{20}^{40}\text{Ca}$ 所放出的能量为1.32兆电子伏,取 $e = 0.1602 \times 10^{-18}$ 库时其值为 $0.211 \times 10^{-12}$ 焦。

利用质能联系公式 $E = mc^2$ 将上述动能转换成质量

$$m = \frac{E}{c^2} = \frac{0.211 \times 10^{-12}}{(2.9979 \times 10^8)^2} = 2.35 \times 10^{-30} \text{ 千克}$$

在研究原子核时质量单位常采用道尔顿(符号为d)作为单位,即取碳的同位素 ${}_{12}^{12}\text{C}_6$ 原子质量的 $\frac{1}{12}$ 作为原子质量单位,1原子质量单位 $d = 1.66053 \times 10^{-27}$ 千克,而通常用作标准的 ${}_{12}^{12}\text{C}$ 的核质量应为12.00000 d。由此得到从 ${}_{10}^{40}\text{K}$ 到 ${}_{20}^{40}\text{Ca}$ 的质量减少了

$$\frac{2.35 \times 10^{-30}}{1.660 \times 10^{-27}} = 0.00142 \text{ d}$$

而 ${}_{10}^{40}\text{K}$ 的质量则为

$$39.96259 + 0.00142 = 39.96401 \text{ d}$$

由上可见质能联系定律在高能的核反应中有着重要的意义,但是在通常只涉及核外电子得失的化学反应中,由于相对来说能量变化不大(一般反应热约几个电子伏),所以不必考虑由此引起的质量变化。

1-4 在光电效应实验中,当用波长为650毫微米的光照射钠金属的光电池时方能产生光电流,试问用325毫米的光照射时,需要多大的抑制电压以使产生的光电流为零。

解:按下式求出波长为650毫微米光波的频率

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{3 \times 10^8}{650 \times 10^{-9}} = 4.62 \times 10^{14} \text{ 秒}^{-1}$$

从而按照爱因斯坦的光子理论求出光子的能量

$$\begin{aligned} E_0 &= h\nu = 0.6625 \times 10^{-33} \text{ 焦} \cdot \text{秒} \times 4.62 \times 10^{14} \text{ 秒}^{-1} \\ &= 0.306 \times 10^{-18} \text{ 焦} \end{aligned}$$

这就是使电子离开金属钠所需的逸出功  $E_0$ 。同理可以求出对应于波长为 325 毫微米的光子能量  $E = 0.612 \times 10^{-18}$  焦。

当应用能量为  $E = h\nu$  的光子去照射逸出功为  $E_0$  的金属时，多余的能量转化为光电子的动能  $\frac{1}{2}mv^2$ ，因而按能量守恒定律有

$$h\nu = E_0 + \frac{1}{2}mv^2$$

由于直接测量光电子的速度有困难，因而实验时可以加抑制电压  $V_0$  使光电流为零，则有关系式

$$eV_0 = \frac{1}{2}mv^2$$

从而求出

$$\begin{aligned} eV_0 &= h\nu - E_0 = (0.612 - 0.306) \times 10^{-18} \\ &= 0.306 \times 10^{-18} \text{ 焦} \\ V_0 &= \frac{0.306 \times 10^{-18} \text{ 焦}}{0.1602 \times 10^{-18} \text{ 库}} = 1.91 \text{ 伏} \end{aligned}$$

**1-5** 在光电效应实验中，用波长为 2302 到 3130 埃光谱区的汞谱线去照射铝金属的表面。设在用波长为  $\lambda$  (埃) 的光去照射铝表面所产生的电流要求用电压  $V$  (伏) 加以抑制(表 1)。试计算铝的特征频率和普朗克常数。

**解：**按照光子理论，吸收光子后的能量守恒关系更准确地应写为

$$h\nu = E_i + E_0 + eV_0 \quad (1)$$

其中  $E_i$  为从正常原子中移去一个电子所需的能量 (电离能),  $E_0$  为从金属中移去一个电子所需的逸出功,  $eV_0$  为发射出的光电子动能。由于在金属格子中电子易于形成所谓电子气, 即  $E_i \approx 0$ , 因而(1)式可写为

$$h\nu = E_0 + eV_0 \quad (2)$$

若令  $h\nu_0 = E_0$ , 则有

$$eV_0 = h(\nu - \nu_0) \quad (3)$$

其中  $\nu_0$  就是所谓临界频率。

由(2)式可见  $V_0$  和  $\nu$  为线性关系, 该线的斜率为  $h/e$ , 截距为  $\frac{h}{e}\nu_0$ 。将表 1 的数据作图或用最小方根方法可以得到

$$\frac{h}{e} \times 10^{17} = 1.3712 \text{ 尔格} \cdot \text{秒} / \text{e. s. u}$$

$$h \times 10^{27} = 6.585 \text{ 尔格} \cdot \text{秒} / \text{分子}$$

$$\nu_0 \times 10^{-15} = 0.7259 / \text{秒}$$

由此得到普朗克常数  $h = 6.585 \times 10^{-27}$  尔格·秒, 和精确值  $6.625 \times 10^{-27}$  尔格·秒很接近。

表 1 不同波长的抑制电压

$\lambda$ (埃)	$V_0$ (伏)
2534.77	1.879
2633.66	1.661
2967.28	1.172
3125.66	0.958

1-6 试证明在康普顿-吴有训的 X-射线散射实验中, 自由电子不能吸收光而只能散射光。

解: 按光子理论, X-射线可以看作能量为  $h\nu$  和动量为  $h\nu/c$  的光子。在和电子发生碰撞时 (图 1-2), 按照能量守恒和动量守

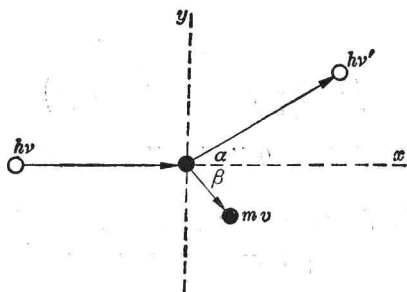


图 1-2 康普顿-吴有训效应

恒定律分别得到

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + m_0c^2 \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad (1)$$

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c} \cos \alpha + \frac{m_0v}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \cos \beta \quad (\text{动量的 } x \text{ 分量}) \quad (2)$$

$$0 = \frac{h\nu'}{c} \sin \alpha - \frac{m_0v}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \sin \beta \quad (\text{动量的 } y \text{ 分量}) \quad (3)$$

其中的  $m_0$  为电子的静止质量。由于电子运动的速度  $v$  可能相当大，故在写出上式时引用了质量  $m$  和运动速度  $v$  之间的相对论公式

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad (4)$$

完全吸收意味着  $\nu' = 0$ 。从(2)、(3)两式利用  $\cos^2\beta + \sin^2\beta = 1$  消去  $\beta$  后得到

$$\frac{h\nu}{c} = \frac{m_0v}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}} \quad (5)$$

结合(1)和(5)式得到

$$\frac{1}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}} - 1 = -\frac{\frac{v}{c}}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}$$

解出  $\frac{v}{c} = 0$ ，从而导致  $v = 0$  的错误结论。因而完全地被自由电子吸收是不可能的，而只能产生  $v$  和  $v'$  都不为零的光散射效应。

按照上述结论又如何解释在光电效应中量子整个地被吸收现象呢？这是由于电子与金属结合着，有一部分光子的能量被用于克服逸出功，而并未被电子全部吸收。

**1-7** 在 X-射线散射实验中，用波长为  $\lambda$  的 X-射线光子照射在由低原子量元素组成的分子上，由于其中电子引起的散射而使在散射角为  $\alpha$  方向的 X-射线波长改变到  $\lambda'$ ，实验结果如表 1 所示，试计算并解释所得结果。

解：消去上题中(1)–(3)式中的  $\beta$  和  $v$  就得到波长位移公式

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{2h}{m_0c} \sin^2 \frac{\alpha}{2}$$

将各种基本常数代入上式后就可以求出不同角度  $\alpha$  的波长位移，例如当  $\alpha = 90^\circ$  时

$$\Delta\lambda = 0.048 \sin^2 45^\circ = 0.0244 \text{ 埃}$$

对其它角度计算的结果也列于表 1 中。考虑到实验上的困难性，

表 1 光电效应中的散射角

物 质	散 射 角				
	30	45	60	75	90
	$\Delta\lambda$ (埃)				
石 墨	0.010	0.0013	0.015	0.021	0.027
铝	0.006	0.010	0.015	0.020	0.025
石 蜡	0.005	0.010	0.013	0.020	0.024
计 算	0.0032	0.0071	0.021	0.018	0.024

可以认为这是相当符合的。

从近似的理论上,  $\Delta\lambda$  似应与所用的实验物质无关。实际上电子在原子中的束缚愈大, 则从它打出来的量子所得到的能量愈小。在石蜡之类的轻原子中电子的束缚较小, 而且轻原子的电子比较“自由”, 比重原子得到更强的位移线, 所以计算和实验更为一致。

康普顿-吴有训效应是最早证实 X-射线具有粒子性的实验之一。

1-8 在考虑到相对论效应后, 试求①电子在电压为  $V$  伏特的高电势差下的运动速度  $v$ , ②和该电子的德布洛意波长  $\lambda$ 。

解: ① 通过  $V$  伏特电势差后电子具有动能

$$E_{\text{动}} = \frac{eV}{300} \quad (1)$$

而按爱因斯坦相对论其动能又可以表示为

$$E_{\text{动}} = mc^2 - m_0c^2 = m_0c^2 \left( \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right) \quad (2)$$

因此速度可写为

$$v = c \left[ 1 - \frac{1}{\left( \frac{eV}{300} \frac{1}{m_0c^2} + 1 \right)^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3)$$

假定  $\frac{eV}{300} \ll m_0c^2$ , 则近似地有

$$\begin{aligned} v &= c \left[ 1 - \left( \frac{eV}{300} \frac{1}{m_0c^2} + 1 \right)^{-2} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &\approx c \left\{ 1 - \left[ 1 - \frac{2eV}{300m_0c^2} + 3 \left( \frac{eV}{300m_0c^2} \right)^2 \right] \right\}^{\frac{1}{2}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\approx c \left( 2 \frac{eV}{300m_0c^2} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ 1 - \frac{3}{2} \left( \frac{eV}{300m_0c^2} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \\
&\approx \sqrt{\frac{eV}{150m_0}} \left( 1 - \frac{3}{4} \frac{eV}{300m_0c^2} \right) \\
&\approx \sqrt{\frac{eV}{150m_0}} \left( 1 - \frac{eV}{400m_0c^2} \right) \quad (4)
\end{aligned}$$

② 物质波的斗布洛衣波长

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{h}{p} = \frac{h}{m_0 \left( \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \right) v} = \frac{h}{m_0 \left( \frac{1}{1-\frac{v^2}{2c^2}} \right) v} \\
&= \frac{h}{m_0 v \left( 1 + \frac{v^2}{2c^2} \right)} = \frac{h}{m_0 v \left( 1 + \frac{E_{\text{动}}}{m_0 c^2} \right)} \quad (5)
\end{aligned}$$

将(1)、(4)两式代入后

$$\begin{aligned}
\lambda &= \frac{h}{m_0 \sqrt{\frac{eV}{150m_0}} \left( 1 + \frac{eV}{300m_0c^2} \right) \left( 1 - \frac{eV}{400m_0c^2} \right)} \\
&= \sqrt{\frac{h^2}{m_0 e}} \sqrt{\frac{150}{V}} \left( 1 - \frac{e}{1200m_0c^2} V \right) \\
&= \frac{12.25}{\sqrt{V}} (1 - 0.49 \times 10^{-6} V) \text{埃} \quad (6)
\end{aligned}$$

应该注意，当  $V$  较大时（例如  $V > 10^6$  电子伏）必须应用更精确的(3)式代入(5)式进行计算。

1-9 试求①一粒重量为 0.000010 克的砂子，以 1.0 厘米/秒速度运动时的斗布洛衣波长为多少？②一个电子受 0.1 兆电子伏加速后的波长是多少？

解：①根据斗布洛衣波长公式

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$\begin{aligned} \text{由 } h &= 6.63 \times 10^{-27} \text{ 尔格} \cdot \text{秒} \\ &= 6.63 \times 10^{-27} \text{ 克} \cdot \text{厘米}^2 / \text{秒} \end{aligned}$$

得到

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{6.63 \times 10^{-27} \text{ 克} \cdot \text{厘米}^2 / \text{秒}}{(1.0 \times 10^{-5} \text{ 克})(1.0 \text{ 厘米} / \text{秒})} \\ &= 6.63 \times 10^{-22} \text{ 厘米} \end{aligned}$$

这个波长是如此之小，以致无法用目前的光栅设备进行检测。

② 对于受 0.1 兆电子伏加速的电子，根据上题所导出的公式求出其斗布洛衣波长为

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{12.25}{10^3} (1 - 0.049) \text{ 埃} \\ &= 6.28 \times 10^{-3} \text{ 埃} \end{aligned}$$

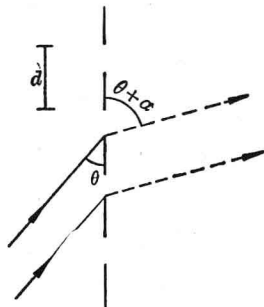
在用更低的加速电压时会得到波长更长的斗布洛衣波，从而可以利用晶体等作为光栅而观察到它的衍射效应。

**1-10** 图 1-3 为电子衍射实验的示意图，所用光栅线距  $d = 7.70 \times 10^{-4}$  厘米，在实验时使用的加速电压  $V = 70$  伏，其一级衍射的角度  $\alpha_1 = 5.30 \times 10^{-3}$ ，二级衍射角度  $\alpha_2 = 7.8 \times 10^{-3}$ （指衍射线和反射线的夹角，用弧度作单位）。试求电子的波长。并将其和斗布洛衣关系式的计算值相比较。

解：按图 1-3 所示的符号及 1-11 题中(1)式，电子发生衍射时满足关系式

$$n\lambda = d[\cos \theta - \cos(\theta + \alpha)]$$

其中  $n$  为衍射级次 ( $n = \pm 1, \pm 2 \dots$ )， $d$  为光栅常数。



当  $\theta$  和  $\alpha$  很小时，可以将余弦展 图 1-3 电子衍射实验示意图  
开成级数；当略去三次项以上的项次后得到简化公式



$$n\lambda = \frac{d}{2}\alpha(\alpha + 2\theta)$$

将一级衍射实验数据代入得到

$$\lambda = \frac{7.70}{2} \times 10^{-4} \times 5.30 \times 10^{-3} (5.30 \times 10^{-3} + 2\theta)$$

将二级衍射实验数据代入得到

$$2\lambda = \frac{7.7}{2} \times 10^4 \times 7.8 \times 10^{-3} (7.8 \times 10^{-3} + 2\theta)$$

联立消去上二式中的  $2\theta$  后求出

$$\lambda = 1.42 \text{ 埃}$$

假定斗布洛衣关系式适于电子，则电子的波长可以按 1-8 题中(6)式近似地求出

$$\lambda \approx \frac{h}{\sqrt{me}} \sqrt{\frac{150}{V}}$$

其中  $V$  用伏特作单位，电子的电荷  $e = 0.16022 \times 10^{-18}$  库仑  $= 4.802 \times 10^{-10}$  静电单位)。将已知数据代入后得到

$$\begin{aligned} \lambda &= \left( \frac{6.625^2 \times 10^{-54} \times 150}{9.108 \times 4.803 \times 10^{-38} \times 70} \right)^{\frac{1}{2}} \\ &= 1.47 \times 10^{-8} \text{ 厘米} = 1.47 \text{ 埃} \end{aligned}$$

可见实验值和理论值的差别小于 4%。电子衍射实验进一步证实了电子的波动性。

**1-11** 我们熟知，从光的波动性可以导出光线通过衍射光栅时必须符合光栅的衍射条件

$$n\lambda = d(\cos \phi - \cos \phi') \quad (1)$$

试从光的微粒性出发，假定光栅具有量子化性质，(即假定光栅只能接受量子化数值的动量)而导出上述衍射公式。

**解：**当光量子与光栅发生不改变频率而只改变方向的弹性碰撞过程时，假定以  $\phi$  及  $\phi'$  分别表示光量子的入射角和反射角，则