

现代物理学丛书

量子力学

卷 I

(第三版)

曾谨言 著

科学出版社

2000

内 容 简 介

本书是作者多年在北京大学物理系教学与科研工作的总结,80年代初出版以来,深受读者欢迎,多次再版重印。为适应改革开放以后我国高校量子力学教学的新情况,本书第二版(1990)做了大幅度修订与增补,分两卷出版,卷Ⅰ可作为本科生教材或主要参考书,卷Ⅱ则作为研究生的教学参考书。鉴于最近20年来量子力学(实验与理论)有了很多新的进展,在第三版中将尽量把这些主要的新进展系统介绍给读者,所以第三版(特别是卷Ⅱ)的内容,又做了很大修订。

卷Ⅰ的主要内容包括量子力学的建立、波函数与 Schrödinger 方程、一维定态问题、力学量用算符表达与表象变换、力学量随时间的演化与对称性、中心力场、粒子在电磁场中的运动、自旋、力学量本征值问题的代数解法、定态微扰论、量子跃迁、多粒子体系的近似处理方法、散射理论。每章均附有习题,书后有有关的数学附录。

图书在版编目(CIP)数据

量子力学·卷Ⅰ /曾谨言著。-3 版。-北京:科学出版社,2000.1
(现代物理学丛书/周光召主编)

ISBN 7-03-007437-8

I. 量… II. 曾… III. 量子力学 IV. O413.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字(1999)第 08775 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号
邮政编码:100717

科地亚印 刷 厂 印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*
1990 年 9 月第 一 版 开本: 850×1168 1/32
1997 年 8 月第 二 版 印张: 24 3/4
2000 年 1 月第 三 版 字数: 644 000
2000 年 1 月第四次印刷 印数: 4 951—8 150

定价: 48.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换(新欣))

第1章 量子力学的诞生

1.1 经典物理学碰到了哪些严重困难?

19世纪末与20世纪初,经典物理学理论(Newton力学,热力学及统计物理学,电动力学)一方面被认为发展到了相当完善的地步,但另一方面又在生产与科学实验面前遇到了不少严重的困难.下面简述几个主要的困难.

1.1.1 黑体辐射问题

冶金高温测量技术及天文学等方面的需求,推动了对热辐射的研究.例如,G. Kirchhoff 定律(辐射吸收与发射率之比的关系,1859),J. Stefan 四次方律(1884)等相继提出.到19世纪末,已认识到热辐射与光辐射都是电磁波,开始研究辐射能量在不同频率范围中的分布问题,特别是对黑体(空腔)辐射进行了较深入的理论上和实验上的研究.

完全黑体(空腔)在与热辐射达到平衡时,辐射能量密度 E_ν 随频率 ν 的变化曲线如图 1.1 所示. $E_\nu d\nu$ 表示空腔单位体积中频率在 $(\nu, \nu + d\nu)$ 之间的辐射能量. W. Wien(1896)从热力学普遍理论考虑以及分析实验数据得出的半经验公式为^①

$$E_\nu d\nu = c_1 \nu^3 \exp[-c_2 \nu/T] d\nu \quad (1)$$

c_1 与 c_2 是两个经验参数, T 为平衡时的温度. 公式与实验曲线符合得不错.

^① W. Wien, *Wied. Ann.*, 58(1896), 662. 根据热力学普遍理论, $E_\nu(T)$ 形式应取 $E_\nu(T) = \nu^3 f(\nu/T)$. 但函数 $f(\nu/T)$ 的形式不能从普遍理论给出. M. Planck, *Ann. der Phys.*, 1(1900), 719, 文中对 Wien 公式的理论基础作了深入论证.

但后来更精细和更全面的实验表明,Wien 公式并非与所有实验数据都符合得那样好. 几位实验物理学家指出, 在长波波段, Wien 公式与实验有明显偏离. 这促使 Planck 去改进 Wien 公式^①. 结果得出了一个两参数的公式, 即(有名的 Planck 公式)

$$E_\nu d\nu = \frac{c_1 \nu^3 d\nu}{\exp[c_2 \nu/T] - 1} \quad (2)$$

与当时已有的几个公式相比, Planck 公式不仅与实验符合得最好, 而且形式也最简单(Wien 公式除外).

与此同时, J. W. Rayleigh(1900), J. H. Jeans(1905)^②根据经典电动力学和统计物理理论, 得出了一个黑体辐射公式, 即(Rayleigh-Jeans 公式)

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

其中 c 为光速, $k (= 1.38 \times 10^{-23} \text{ J/K})$ 是 Boltzmann 常数. 此公式在低频部分与实验曲线还比较符合. 但当 $\nu \rightarrow \infty$ 时, $E_\nu \rightarrow \infty$, 是发散的, 与实验明显不符(所谓“紫外发散困难”).

不难看出, 当 $\nu \rightarrow \infty$ 时, Planck 公式(2)趋于 Wien 公式(1), 而

① M. Planck, *Verh. D. Phys. Ges.*, 2(1900), 202, 文中提到了当时已知的黑体辐射公式, 包括 Wien 公式, Thiesen 公式, Lummer-Jahnke 公式, Lummer-Pringsheim 公式. 但文中未提 Rayleigh-Jeans 公式, 详细情况可参阅 F. Hund, *History of Quantum Theory*, chap 2, p. 25. 书中提到实验物理学家 H. Rubens 和 F. Kurlbaum 的工作, 发现低频部分 Wien 公式与实验明显偏离. Planck 听到此结果后, 立即动手找另外的表达式. D. ter Haar, *The Old Quantum Theory*, Part 1, 书中 p. 9 提到 Planck 当时并不知道 Rayleigh-Jeans 公式. 还可参阅 E. U. Condon, *Physics Today*, 1962, No. 10.

② Lord Rayleigh, *Phil. Mag.*, 49(1900), 539; *Nature*, 71(1905), 559, 72(1905), 54, 243. J. H. Jeans, *Nature*, 71(1905), 607, 72(1905), 101, 293; *Proc. Roy. Soc.*, A76(1905), 545. Rayleigh 1900 年文中给出 $E_\nu \propto \nu^2$, 公式中前面的因子的正确结果是 1905 年得出的, Jeans 的工作就是纠正了前面的因子. Rayleigh-Jeans 公式的推导, 例如, 参阅王竹溪, *统计物理学导论*(1957), § 41.

当 $\nu \rightarrow 0$ (长波极限), 趋于 Rayleigh-Jeans 公式 ($c_1/c_2 = 8\pi k/c^3$)^①.

Planck 提出这个公式后,许多实验物理学家立即用它去分析了当时最精确的实验数据,发现符合得非常好^②. 他们认为,这样简单的一个公式与实验如此符合,绝非偶然,在这公式中一定蕴藏着一个非常重要但尚未被人们揭示出的科学原理.

1.1.2 光电效应

19世纪末,由于电气工业的发展,稀薄气体放电现象开始引起人们注意. J. J. Thomson (1896) 通过气体放电现象及阴极射线的研究发现了电子. 在此之前, H. Hertz (1888) 发现了光电效应,但对其机制还不清楚. 直到电子发现后,才认识到这是由于紫外线照射,大量电子从金属表面逸出的现象^③. 经过实验研究,发现光电效应呈现下列几个特点:

(a) 对于一定的金属材料做成的(表面光洁的)电极,有一个确定的临界频率 ν_0 . 当照射光频率 $\nu < \nu_0$ 时,无论光的强度多大,不会观测到光电子从电极上逸出.

(b) 每个光电子的能量只与照射光的频率 ν 有关,而与光强度无关. 光强度只影响到光电流的强度,即单位时间从金属电极单位面积上逸出的电子的数目.

(c) 当入射光频率 $\nu > \nu_0$ 时,不管光多微弱,只要光一照上,几

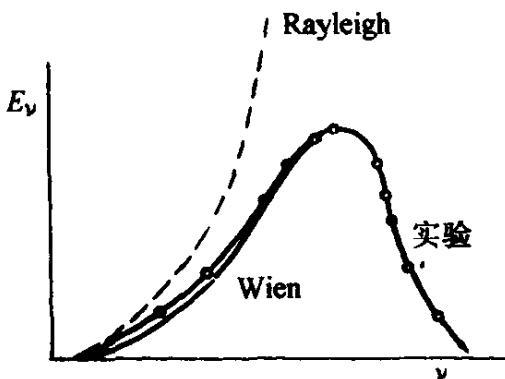


图 1.1

① A. Einstein, *Ann. der Physik*, 17(1905), 132. 是 Einstein 在 1905 年指出, 按经典理论应得到 Rayleigh 公式, 而它与实验有明显矛盾, 特别是“ultraviolet catastrophe”他注意到在长波和高温极限, Planck 公式趋于 Rayleigh 公式, 即经典理论成立, 而 T/ν 很小时, 经典理论不正确, 此时 Planck 公式趋于 Wien 公式.

② 参阅 E. U. Condon, *Physics Today*(1962), No. 10, p. 37.

③ A. Einstein, *Ann. der Physik*, 17(1905), 132 文中, 关于光电效应的实验及分析的资料提到了 Lenard 的工作. 见 P. Lenard, *Ann. der Physik*, 8(1902), 149.

乎立刻($\approx 10^{-9}$ s)观测到光电子. 这与经典电磁理论计算结果很不一致.

以上三个特点,(c)是定量上的问题,而(a)与(b)在原则上无法用经典物理学来解释.

1.1.3 原子的线状光谱及其规律

最原始的光谱分析始于 Newton(17世纪),但直到19世纪中叶,人们把它应用于生产后才得到迅速发展. 例如,R. W. Bunsen, G. Kirchhoff 等人开始利用不同元素所特有的标志谱线来做微量元素的成分分析. 元素铷(Rb)与铯(Cs)就是根据光谱分析发现的.

由于光谱分析积累了相当丰富的资料,不少人对它们进行了整理与分析^①. 1885年,Balmer 发现,氢原子可见光谱线的波数 $\nu = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c}$, λ 为波长 具有下列规律(见图 1.2):

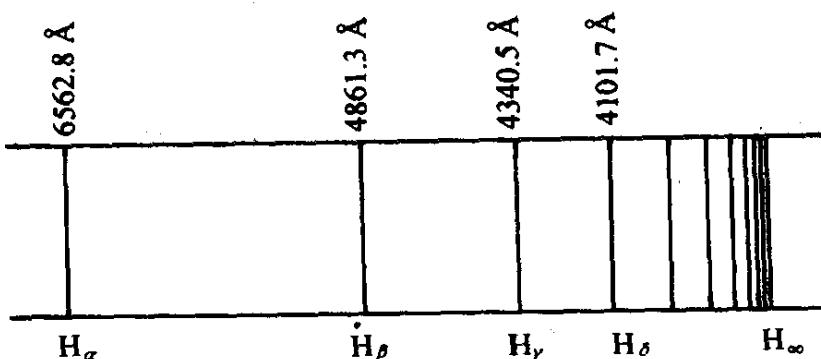


图 1.2 氢原子光谱的 Balmer 线系

① 关于19世纪光谱分析的情况,可参阅 H. Kayser, *Handbuch d. Spektroskopie*, Bd. 1(1900). 对于原子的线状光谱的规律性的探索,除 Balmer 之外,Rydberg 和 Ritz 也有重要贡献. 他们提出了组合规则(combination rule). 见 J. R. Rydberg, *K. Svenska Vetensk. Ak. Handl.* 23, Nr. 11(1890); *Phil. Mag.*, 29(1890), 331; *Ann. der Physik*, 50(1893), 629. W. Ritz, *Z. Phys.*, 9(1908), 521. Paschen 根据组合原则研究氢原子光谱(红外区),得出了 Paschen 线系, $\nu = R \left(\frac{1}{9} - \frac{1}{n^2} \right)$, $n = 4, 5, 6, \dots$.

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

$$R = 109677.581 \text{cm}^{-1} \quad (\text{Rydberg 常数})$$

Balmer 公式与观测结果的惊人符合,引起了光谱学家的注意。紧跟着就有不少人对光谱线波长(波数)的规律进行了大量分析。例如,Rydberg 对碱金属元素的光谱进行过仔细分析,发现它们可以分为主(principal)线系、锐(sharp)线系及漫(diffuse)线系等几个线系。每一线系的各条谱线的波数,都有与式(4)类似的规律。W. Ritz(1908)的组合规则(combination rule)对此作了更普遍的概括。按此原则,每一种原子都有它特有的一系列光谱项 $T(n)$,而原子发出的光谱线的波数 $\tilde{\nu}$,总可以表成两个光谱项之差,即

$$\tilde{\nu}_{nm} = T(n) - T(m) \quad (5)$$

其中 m 与 n 是某些正整数。显然,光谱项的数目比光谱线的数目要少得多。

这样,人们自然会提出以下一系列问题:原子光谱为什么不是连续分布而是呈分立的线状光谱?原子的线状光谱产生的机制是什么?这些谱线的波长(波数)为什么有这样简单的规律?光谱项的本质又是什么?…^①。

1.1.4 原子的稳定性

1895 年 Röntgen 发现了 X 射线。1896 年 A. H. Bequerel 从

① 值得提到,N. Bohr 在发表他的划时代的三篇论文(1913年4月5日)之前,直到1913年2月都没有考虑原子线状光谱的规律问题。到1913年3月初,他把论文送给 Rutherford 时,文章中才有关于氢原子光谱的研究,并告诉 Rutherford 他已能解释氢原子光谱的规律。1913年,H. M. Hansen 自 Göttingen 回到 Copenhagen,曾经问 Bohr 能否用他的理论解释光谱规律,Bohr 说这可能是极为困难的。Hansen 把 Rydberg 的简单规律告诉了 Bohr。可见 Bohr 是在很晚的阶段才把光谱规律吸收到他的理论中去。后来 Bohr 说,他看到 Balmer 公式后,一切问题都趋于明朗。令人惊奇的是,发现光谱规律的 Rydberg 就在 Lund 大学工作,与 Copenhagen 近在咫尺,想必与 Bohr 有经常接触,而 Bohr 在如此长时间对这方面工作不了解,未触及此问题,而这问题正是他的理论解决得最出色的部分(Hund, History of Quantum Theory, p. 70)。

铀盐发现了天然放射性(后来弄清楚,这些天然放射线由 α 、 β 及 γ 三种射线组成). 1898年,Curie 夫妇发现了放射性元素钋与镭.

电子与放射性的发现揭示出:原子不再是物质组成的永恒不变的最小单位,它们具有复杂的结构,并可互相转化. 原子既然可以放出带负电的 β 粒子来,而原子又是中性的,那么原子是怎样由带负电的部分(电子)与带正电的部分结合起来的?这样,原子的内部结构及其运动规律的问题就提到日程上来了.

Thomson(1904)曾经提出如下模型:正电荷均匀分布在原子中(原子大小 $\approx 10^{-8}$ cm),而电子则在原子中作某种有规律的排列. 1911年,Rutherford 用 α 粒子去打击原子,研究碰撞后散射出去的 α 粒子的角分布,并与模型计算值比较,发现 Thomson 模型无法解释大角度散射. 他提出:原子中正电部分集中在很小区域中($< 10^{-12}$ cm),原子质量主要集中在正电部分,形成“原子核”,而电子则围绕着它运动(与行星绕太阳系运动很相似),这就是今天众所周知的“原子有核模型”.

但是 Rutherford 模型也碰到了严重的困难. 首先 Rutherford 模型中没有一个特征长度^①. 从 19 世纪统计物理学研究,人们已了解到原子的大小 $\approx 10^{-8}$ cm. 在 Thomson 模型中,根据电子排列的空间构形(configuration)的稳定性,可以找到这样一个合理的特征长度. 然而在经典物理学框架中来考虑 Rutherford 模型,却找不到一个合理的特征长度:其次,由于电子在原子核外作加速运动,而按经典电动力学,加速运动的带电粒子将不断辐射而丧失能量. 因此,围绕原子核运动的电子,终究会大量丧失能量而“掉到”原子核中去. 这样,原子也就“崩溃”了. 但现实世界表明,原子是稳

① 根据电子的特性(质量 m ,电荷 e),在 Maxwell 电动力学中,可以出现一个特征长度,即 $r_c = e^2/mc^2 \approx 2.8 \times 10^{-13}$ cm,即经典电子半径. 由于 $r_c \ll 10^{-8}$ cm,而且光速 c 出现其中(原子中电子速度 $\ll c$),所以, r_c 完全不适合于用来表征原子的大小. 但如把作用量子 \hbar 引进 Rutherford 模型,根据量纲分析,可以找到下列特征长度,即 $a = \hbar^2/me^2 \approx 0.53 \times 10^{-8}$ cm(后来人们称之为 Bohr 半径). 这样,Rutherford 模型碰到的第一个困难就解决了.

定地存在着。矛盾尖锐地摆在面前，怎样解决呢？

1.1.5 固体与分子的比热问题

固体中每个原子在其平衡位置附近作小振动，可以看成是具有三个自由度的粒子。按照经典统计力学，其平均动能与势能均为 $\frac{3}{2}kT$ ，总能量为 $3kT$ 。因此，一克原子固体物质的平均热能为 $3NkT = 3RT$ ($N = 6.023 \times 10^{23}$ 是 Avogadro 数， $R = Nk$ 称为气体常数)。因此，固体的定容比热为

$$C_V = 3R \approx 5.958 \text{ cal/K}^{\textcircled{1}}$$

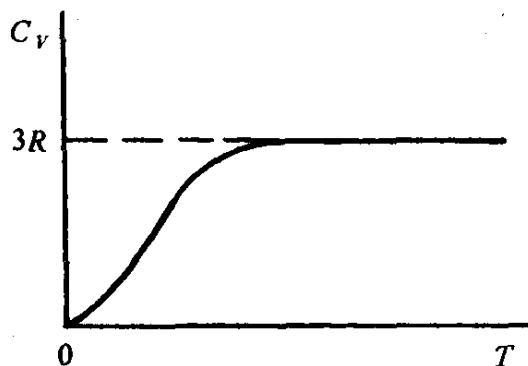


图 1.3 固体比热

此即 Dulong-Petit 经验定律(1819)。但后来实验发现，在极低温下，固体比热都趋于 0，如图 1.3 所示。这原因是什么？此外，若考虑到原子由原子核与若干电子组成，为什么原子核与电子的这样多自由度对于固体比热都没有贡献？(Boltzmann 佯谬，1890.)

多原子分子的比热也存在类似的问题。例如，双原子分子 ($\text{N}_2, \text{O}_2, \text{H}_2, \text{CO}$ 等)，可以认为有 5 个自由度(三个平动自由度及两个转动自由度)，比热应该为 $\frac{5}{2}R \approx 5 \text{ cal/K}$ 。在常温下，观测结果

① $1 \text{ cal} = 4.18 \text{ J}$.

的确与此相近。但在温度低于 60K 后，它们的比热都下降到了 3cal/K 左右。这原因又是什么？

量子理论就是在解决这些生产实践和科学实验同经典物理学的矛盾中逐步建立起来的。

1.2 Planck-Einstein 的光量子论

历史上，量子理论是首先在黑体辐射问题上突破的。上节已经提到，由于 Wien 的黑体辐射公式在低频部分与实验结果有明显偏离，Planck 在解决此问题的探索中，提出了（1900 年 10 月 19 日）一个新的黑体辐射公式（Planck 公式）。一方面由于 Planck 公式与实验的惊人符合，另一方面由于公式十分简单，在实验物理学家的鼓励下，Planck 进一步去探索这公式所蕴含的更深刻的本质。经过近两个月紧张努力，他发现（1900 年 12 月 4 日）^①，如果作下列假设，就可以从理论上推出他找到的黑体辐射的公式^②。这个假设是：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， h 为一个普适常数。换言之，吸收或发射电磁辐射只能以“量子”方式进行，每个“量子”的能量为

$$\epsilon = h\nu \quad (1)$$

① M. Planck, *Verh. D. Phys. Ges.*, 2(1900), 202, 提出黑体辐射公式。M. Planck, *Verh. D. Phys. Ges.*, 2(1900), 237, 提出理论解释，正式论文发表于：M. Planck, *Ann. der Physik*, 4(1901), 553. 他在假设 $\epsilon = h\nu$ 之下，得出了黑体辐射公式

$$E_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \frac{1}{\exp[h\nu/kT] - 1}$$

即 $c_2 = h/k$, $c_1 = 8\pi h/c^3$. Planck 本人强调，为要与实验符合， h 必须取有限值，而经典物理理论则要求 $h \rightarrow 0$. Planck 后来写道：“…这个很特别的常数 h 的物理意义的阐明，是极困难的理论问题，它的引进导致经典物理理论失效，这比我最初的认识要基本得多…”。但直到 Einstein 引进光量子概念之后， h 的物理意义及 Planck 理论的基础才搞清楚（D. ter Haar, *Problems in Quantum Mechanics*, pp. 13~14）。

② Planck 公式的推导可参阅王竹溪，统计物理学导论，§ 42, 1957, 或 E. T. Whittaker, *A History of the Theories of Aether and Electricity*, chap. 3, 1951; D. ter Haar, *The old Quantum Theory*, chap. 1, 1967.

这种吸收或发射电磁辐射能量的不连续性概念，在经典力学中是无法理解的。所以尽管 Planck 的假设可以解释他的与实验符合得非常好的公式，却并未引起很多人的注意^①。

首先注意到量子假设有可能解决经典物理学所碰到的其它困难的是 A. Einstein^②。他在 1905 年用 Planck 的量子假设去解决光电效应问题，进一步提出了光量子概念^③，即认为辐射场由光量子组成，每一个光量子的能量与辐射场的频率的关系是

$$E = h\nu \quad (2)$$

并根据狭义相对论以及光子以光速 c 运动的事实得出，光子的动量 p 与能量 E 有如下关系：

$$p = E/c$$

因此，光子的动量 p 与辐射场的波长 λ 有下列关系：

$$p = h/\lambda \quad (3)$$

当采用了光量子概念之后，光电效应问题立即迎刃而解。当光量子射到金属表面时，一个光量子的能量可能立即被一个电子吸收。但只当入射光频率足够大，即每一个光量子的能量足够大时，

① 例如，J. W. Gibbs, Statistical Mechanics (1902) 及 J. H. Jeans, Kinetic Theory of Gases (1904) 两书均未提及 Planck 的工作。

② A. Einstein, *Ann. der Physik*, 17(1905), 132. 在此期刊的同一卷中，Einstein 连着发表了三篇划时代的论文。本文是其中第一篇。另外一篇是关于 Brown 运动，一篇是关于狭义相对论。由于第一篇论文引进光量子概念他得到 Nobel 物理学奖（不是因为提出狭义相对论）。应当提到，不少人常说 Einstein 1905 年的文章主要是去解释光电效应，但实际情况并非如此。事实上，当时光电效应的测量还没有达到那样高的精度足以指明它与经典行为确切背离(D. ter Haar, Problems in Quantum Mechanics, p. 15)。关于光电效应的讨论只占文章很小一部分(第 8 节)。文中用了很大篇幅讨论黑体辐射规律不能纳入经典 Maxwell 理论。第 7 节讨论荧光现象(Stokes 规则，发射光频率低于入射光频率)，第 9 节讨论气体分子在紫外光照射下的游离现象。

③ 后来所用的“光子”(photon)一词是 1926 年由 G. N. Lewis (*Nature*, 18, Dec. 1926) 才提出的。但此概念的实质在 Einstein 一文中已给出。

电子才可能克服脱出功 A 而逸出金属表面^①. 逸出表面后, 电子的动能为

$$\frac{1}{2}mv^2 = h\nu - A \quad (4)$$

当 $\nu < \nu_0 = A/h$ (临界频率) 时, 电子无法克服金属表面的引力而从金属中逸出, 因而没有光电子发出.

A. Einstein (1907) 还进一步把能量不连续的概念用到固体中原子的振动上去, 成功地解决了固体比热在温度 $T \rightarrow 0\text{K}$ 时趋于 0 的现象^②. 这时, Planck 的光的能量不连续性概念才引起很多人注意.

在这里可以看到, 人们对于光的本性的认识是螺旋式上升的. 早期, Newton 认为光是由微粒组成的(微粒说). Huygens 倡议的光的波动说, 只是在 19 世纪 20 年代经过 Fresnel, Young 等的光的干涉与衍射实验证实之后, 才为人们普遍承认. 到 19 世纪下半叶, 经过 Maxwell, Hertz 等人的工作, 肯定了光是电磁波. 而从光电效应及黑体辐射所揭示出的困难又促使人们重新认识到光的粒子性一面. 但 Planck-Einstein 的光量子论决非 Newton 微粒说的简单复归, 而是认识上的一个大飞跃. 光是粒子性与波动性矛盾的统一体. 从 Planck-Einstein 关系式(2)和(3)中就可以看到, 作为一个“粒子”的光量子的能量 E 和动量 p , 是与电磁波的频率 ν 和波长 λ 不可分割地联系在一起的. 在不同的条件下, 主要矛盾方面会发生转化. 例如, 在干涉和衍射实验的条件下, 波动性就成为主要的矛盾方面, 光就表现出像“波”, 而在原子吸收或发射光的情况下, 粒子性就成为主要的矛盾方面, 光就表现出像“粒子”.

光量子概念及 Planck-Einstein 关系式, 在后来 (1923) 的

① 两个或多个光子同时被一个电子吸收的可能性是微不足道的, 实际上不会出现.

② 例如, 参阅王竹溪, 统计物理学导论 (1957), § 60, 固体比热的量子理论.

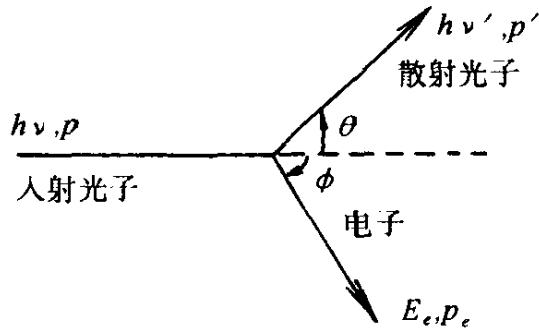


图 1.4

Compton 散射实验中得到了直接的证实^①. 早在 1912 年 C. A. Sadler & A. Meshan 就发现 X 射线被轻原子量的物质散射后, 波长有变长的现象. Compton 建议把这种现象看成 X 射线的光子与电子碰撞而产生的. 假设在碰撞过程中能量与动量是守恒的, 由于反冲, 电子带走一部分能量与动量, 因而散射出去的光子的能量与动量都相应减小, 即 X 射线的频率相应变小而波长增大, 如图 1.4 所示.

在碰撞前电子速度很小, 可视为静止. 而且电子在原子中的束缚能, 相对于 X 射线束中的光子能量, 也很小^②, 因此, 可以视为自由电子. 考虑到动量守恒律的要求, 光子与电子的碰撞只能发生在一个平面中. 假设碰撞过程中能量与动量守恒, 即

$$\left\{ \begin{array}{l} h\nu + mc^2 - h\nu' = E_e \\ p - p' = p_e \end{array} \right. \quad (5)$$

$$(6)$$

$(5)^2/c^2 - (6)^2$, 并利用相对论中能量动量关系式

$$E_e^2/c^2 - p_e^2 = m^2c^2$$

① A. H. Compton, *Phys. Rev.*, 22(1923), 409. 为此, Compton 获 1927 年 Nobel 物理学奖.

② 实验上, 常选用电子束缚能很小的物质, 如石蜡.

可得

$$\frac{1}{c^2}(h\nu + mc^2 - h\nu')^2 - (\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2 = m^2 c^2 \quad (7)$$

对于光子, $p = h\nu/c$, $p' = h\nu'/c$, 则

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

代入式(7), 可解出

$$\nu' = \frac{\nu}{1 + \frac{h\nu}{mc^2}(1 - \cos\theta)} \quad (8)$$

或

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

利用 $\lambda = c/\nu$, $\lambda' = c/\nu'$, 上式改写成

$$\lambda' = \lambda + \frac{h}{mc}(1 - \cos\theta) \quad (9)$$

令

$$\lambda_c = \frac{h}{mc} = 2.43 \times 10^{-2} \text{ Å} \quad (\text{电子的 Compton 波长}) \quad (10)$$

$$\lambda' = \lambda + \lambda_c(1 - \cos\theta)$$

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \lambda_c(1 - \cos\theta) \quad (11)$$

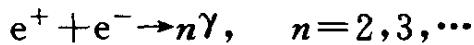
由式(9)可清楚地看出, 散射光的波长随角度增大而增加. 理论计算所得公式与实验结果完全符合.

从式(9)可以看出, 散射的 X 射线波长与角度的依赖关系中包含了 Planck 常数 h . 因此, 它是经典物理学无法解释的. Compton 散射实验是对光量子概念的一个直接的强有力支持, 因为在上述推导中, 假定了整个光子(而不是它的一部分)被散射. 此外,

Compton 散射实验还证实了:(a) Planck-Einstein 关系式(2)和(3)在定量上是正确的.(b) 在微观的单个碰撞事件中,动量及能量守恒律仍然是成立的(不仅是平均值守恒). 这是一个很重要的结论. 对此问题,在历史上有过激烈争论. N. Bohr, H. A. Kramers 和 J. C. Slater 等人曾经认为,在微观过程中动量及能量是统计地守恒,在单个事件中并不一定守恒. 后来,W. Bothe & H. Geiger(1924)用符合计数器进行仔细观测,否定了 Bohr 等人的看法. A. W. Simon(1925)用云室仔细记录光子及反冲电子径迹,分析结果也否定了 Bohr 等人的看法.

“微观的单个碰撞事件中,动量及能量守恒律仍然成立”的结论,在后来发现的“电子对湮没”现象中也得到证实. 1932 年,C. D. Anderson 在宇宙射线中观测到正电子,其质量与电子同,电荷则同值异号. 现在已有很多办法产生正电子 e^+ . 例如,缺中子核的衰变,高能 γ 光子通过物质时在核电场附近产生 e^+e^- 对等.

一个正电子在经过物质时将与原子碰撞而失去大部分能量,逐渐减速,然后可能被某原子捕获,最后与一个 e^- 一道湮没. 在适当条件下,也可能与一个 e^- 形成与氢原子类似的电子偶素,然后才湮没. 在电子对湮没时,考虑到动量守恒,至少要产生两个 γ 光子^①,即



在产生两个光子的情况下,两个光子的动量数值相同,但方向相反. 设产生的光子角频率为 ω ,则按能量守恒律,有

$$2\hbar\omega = 2mc^2 \quad (m \text{ 为电子静质量}) \quad (12)$$

即波长为

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{\hbar}{mc} = 0.0243 \text{ \AA}$$

^① 例如,在 e^+e^- 的质心系中来讨论. 湮没前体系的动量为 0. 若湮没后只产生一个光子,而光子在任何惯性系中速度均为 c ,动量都不为 0,因此违反动量守恒. 所以,至少要产生两个光子,这已为实验证实.

与电子的 Compton 波长相同. 上述分析结果与实验观测一致. 从而再一次证实了在微观的单个事件中, 能量与动量守恒律仍然成立.

1.3 Bohr 的量子论

Planck-Einstein 的光量子以及实物粒子($m \neq 0$)能量不连续的概念, 必然会促进物理学其它重大疑难问题的解决. 当时正逢 Rutherford 的原子有核模型提出, 而从经典物理学来处理 Rutherford 模型, 既不能给出原子的一个特征长度, 也无法解释原子的稳定性. 在此发生尖锐矛盾的时刻, Bohr 把 Planck-Einstein 的概念创造性地运用来解决原子结构和原子光谱的问题, 提出了他的原子的量子论^①. 首先, 从原子的稳定性的分析中, Bohr 深刻认识到在原子世界中必须背离经典电动力学, 必须用新观念和新原理来处理. 正如 Bohr 后来讲到^②, 他从一开始就深信作用量子 (quantum of action) 是解决原子问题的关键. Bohr 的原子的量子论的主要贡献是, 它提出了两个极为重要的概念(或者说假定), 可以认为这是对大量实验事实深刻分析后所做的概括, 即^③

(a) 原子能够, 而且只能够, 稳定地存在于与分立的能量(E_1, E_2, E_3, \dots)相对应的一系列状态中. 这些状态称为定态(stationary

① Bohr 于 1911 年 9 月赴英国剑桥, 在 J. J. Thomson 领导的 Cavendish 实验室作过短期逗留. 翌年, 即赴 Manchester, 在 Rutherford 领导的实验室工作. 不久即集中力量研究 Rutherford 模型遇到的困难. Thomson 模型(1904 提出)曾流行一时, 几乎达十年之久, 很少有人提到 Rutherford 模型. Bohr 以他深刻的洞察力抓住这个问题, 最后他成功地说明了氢原子光谱的规律性, 写成了三篇划时代的论文[后人称之为“伟大的三部曲”(Great Trilogy)], 题名为 On the Theory of Atomic Constitution, 发表在: N. Bohr, *Phil. Mag.*, 26(1913), pp. 1~25, 471~502, 857~875.

② 见 The Rutherford Memorial Lecture (1958), *Proc. Phys. Soc. (London)* 78 (1961). 后转载于 N. Bohr, *Atomic Physics and Human Knowledge*, Vol. II (1963, New York, John Wiley & Sons) 一书中.

③ N. Bohr, *Proc. Dan. Aca. Sc.* (1918), (8)4, No I, Part I, II. *Proc. Dan. Aca. Sc.*, (1922), (8)4, No. I, Part III. 转引自 D. ter Haar, *Old Quantum Theory*, p. 43. 这里几乎是逐字逐句从原文译出.

state). 因此, 原子能量的任何改变, 包括吸收和发射电磁辐射, 都只能在两个定态之间以跃迁(transition)的方式进行.

(b) 原子在两个定态(分别属于能级 E_n 和 E_m , 设 $E_n > E_m$)之间跃迁时, 吸收或发射的辐射的频率 ν 是唯一的, 由

$$h\nu = E_n - E_m \quad (\text{频率条件})$$

给出.

简单说来, Bohr 量子论中核心的思想有两条: 一是原子具有能量不连续的定态的概念, 二是两个定态之间的量子跃迁的概念以及频率条件. 它们在后来建立起来的量子力学中, 仍然被保留了下来.

对于 Bohr 提出的两条基本假定, 我们再作适当说明: 第一个假定涉及原子能量的量子化及稳定性问题, Planck-Einstein 的辐射的量子论中提出, 辐射与物体(由原子组成!)之间交换能量(吸收或发射光)是以光量子方式进行. 在 Bohr 理论中提出了原子能量量子化的概念. 这样, 两个理论就显得十分和谐. 关于稳定性问题, 除了表现在加速电子要放出辐射而丧失能量之外, 还表现在 Rutherford 模型中原子对于外界(其它粒子)碰撞是极不稳定的, 这都迫使人们必须引进原子能量量子化及定态之间量子跃迁的概念. 有了这些概念之后, 前面提到的关于分子和原子比热的 Boltzmann 佯谬也就迎刃而解.

如果说原子能量量子化概念还可以从 Planck-Einstein 的光量子论中找到某种启示, 量子跃迁概念和频率条件则是 Bohr 很了不起的创见, Einstein 对这一点给予了极高的评价^①: 按照经典电动力学, 一个带电体系, 如以某特征频率 ν_c 振动, 则体系可发出

^① A. Einstein, *Science*, 113(1951), 82. 或见 ter Haar, *The Old Quantum Theory*, chap 4. Einstein 在分析了辐射现象与经典理论之间严重矛盾之后提到, 他曾经企图修改理论物理基础去说明辐射现象, 但一切努力均告失败. 对 Bohr 提出的量子跃迁和频率条件对光谱规律作出的漂亮解释, Einstein 写道: "...appeared to me like a miracle — and appears to me as a miracle even today. This is highest form of musicality in the sphere of thought".