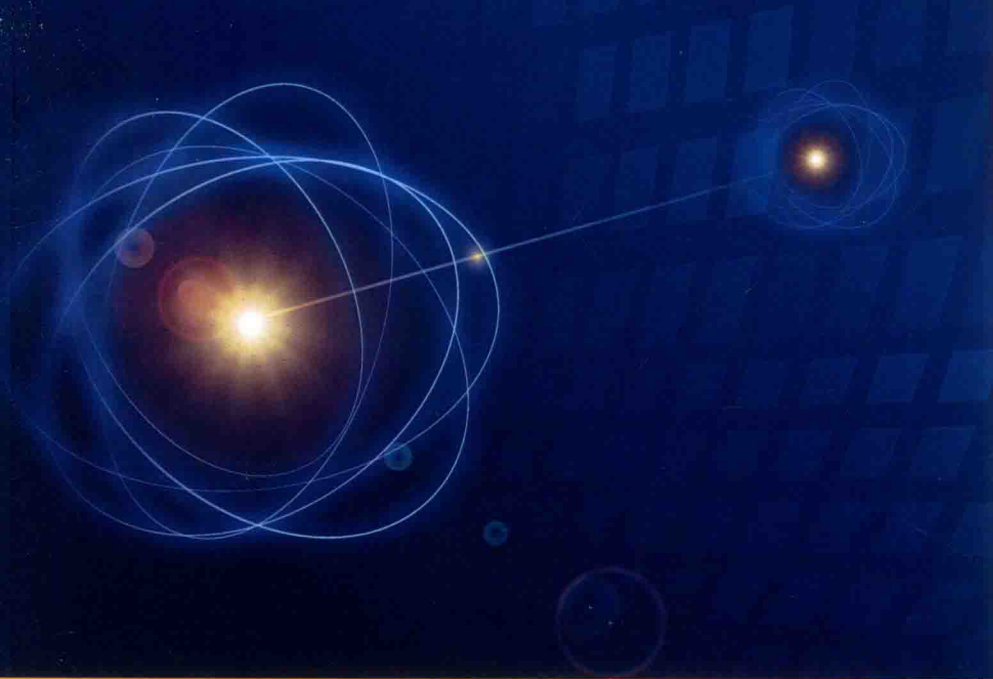




# 实用量子力学教程

曾春华 周凌云 主编



科学出版社

# 实用量子力学教程

曾春华 周凌云 主编



科学出版社

北京

## 内 容 简 介

本书共 7 章,第 1 章为早期量子论及物质的波粒二象性,第 2~6 章为量子力学的基本内容,第 7 章为量子力学的常用近似方法.本书除介绍一般量子力学书中内容外,还简述了富勒烯、石墨烯、碳纳米管、低维量子力学(量子阱、量子线及量子点)、EPR 悖论、贝尔不等式及量子纠缠等内容,并引用了编者的一些研究工作.本书每章后都有小结和相关习题,且配有参考答案.

本书适合理工科大学本科生学习量子力学使用,也可作为工科相关专业研究生量子力学教学参考书.

### 图书在版编目(CIP)数据

实用量子力学教程 / 曾春华,周凌云主编. —北京:科学出版社,2019.7  
ISBN 978-7-03-061195-6

I. ①实… II. ①曾…②周… 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(2019)第 090103 号

责任编辑:罗 吉 陈曰德 / 责任校对:郭瑞芝  
责任印制:张 伟 / 封面设计:迷底书装

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

北京建宏印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

\*

2019 年 7 月第 一 版 开本:720×1000 B5

2019 年 7 月第一次印刷 印张:11

字数:222 000

定价:39.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换)

## 前 言

我要把人生变成科学的梦，然后再把梦变成现实。

——居里夫人

20 世纪那场惊天动地的科学革命序幕，是这样拉开的。1899 年 12 月 30 日晚上，欧洲著名科学家欢聚一堂，会上，英国著名物理学家开尔文男爵发表了新年祝词“……物理学的大厦已落成，剩下的仅为一些修饰工作……”，在展望未来世纪物理学的前景时，他却若有所思地讲道“完美的、晴朗的天空却被两朵乌云笼罩……”，众所周知，一朵乌云指的是迈克耳孙实验与以太说的矛盾；另一朵乌云主要指的是黑体辐射相关实验中出现的当时理论无法解释的所谓紫外灾难。科学家们为驱散这两朵乌云而奋斗，掀起了一场轰轰烈烈的科学革命，驱散了“两朵乌云”，诞生了以相对论和量子力学为代表的新兴科学。相对论和量子力学不仅给自然科学基础的物理学带来了革命性的突破，还产生了物理学的诸多新分支(固体量子论、量子光学等)，物理学的这一革命性的进展推动了其他自然科学的发展，出现了量子化学、量子生物学等新兴学科，使这些学科在微观层次认识事物之本质。由此，不断衍生出相关的交叉学科。在这些新兴科学的土壤上，孕育出了许多前所未有的新兴技术及工业，如核技术、核工业、激光技术、红外技术、等离子体技术、光导、液晶工业、半导体工业、超导技术，并发明了如扫描隧道显微镜、原子力显微镜及相关的检测技术。可见，20 世纪诞生的新兴科学在一定程度上有助于推动 21 世纪新的经济大繁荣，迎来自然科学、应用科学交叉融合的新发展。

鉴于 20 世纪 80 年代，非线性科学的兴起和发展，其理论必然要涉及量子力学，于是就产生了非线性量子力学的一些思想和概念，且很快应用于粒子物理、量子光学、量子通信、量子卫星、量子计算机、凝聚态物理、激光物理、生物学及医学等学科上。非线性量子力学理论还有待完善，其应用更需探索，但真理是在探索中发展起来的。真理始于探索，并在探索中完善。正如左拉所说：“当真理被埋于地下时，它仍在生长着，它虽受压迫，但却蓄积着一种爆炸性的力量，一旦爆发就会炸毁一切”。非线性量子力学对未来社会的推动作用将是难以估量的，故本书讲述了一些如非线性量子力学等有待进一步探索的内容，也引用了我们的一些探索性工作，以期激发学生对探索的兴趣。这些内容如果能对读者起抛

砖引玉的作用,已足慰编者.

本书编者在工科学学校讲授量子力学(物理专业或非物理专业课程)时,必在讲清量子力学的基本理论知识的前提下,讲授其应用,使学生感受量子力学的“玄妙”及精巧之处,不被那些纷繁的数学演绎困扰,而津津乐道于量子力学思想的精髓及其对现实世界的认识,进而使学生致力于用新的量子力学理论去更新技术.这就是我们将本书定名为《实用量子力学教程》之缘由.

本书从筹划到汇编成册历时较长,并经数次修改完善,最终定稿.编者特此感谢昆明理工大学《实用量子力学教程》教材建设项目、国家自然科学基金项目(11665014)、云南省基金项目(2017FB003、2015HB025)、云南省首届优秀青年基金和“万人计划”青年拔尖人才计划等对本书的支持.由于篇幅所限,低维量子力学问题和量子纠缠等新内容难以全面反映总体情况,恳请谅解.同时也感谢云南大学熊飞博士、昆明理工大学薛宇飞博士、田冬博士和罗玉辉博士等为本书出版所做出的辛勤劳动.因我们水平和经验有限,本书难免存在些许的瑕疵,敬请读者批评指正.

曾春华 周凌云

2019年7月

# 目 录

## 前言

|                                   |    |
|-----------------------------------|----|
| 第 1 章 早期量子论及物质的波粒二象性 .....        | 1  |
| 1.1 黑体辐射及普朗克的量子假说 .....           | 1  |
| 1.2 光电效应和光的波粒二象性 .....            | 3  |
| 1.3 玻尔理论 .....                    | 5  |
| 1.4 物质的波粒二象性 .....                | 8  |
| 小结 .....                          | 9  |
| 习题 .....                          | 9  |
| 第 2 章 薛定谔方程 .....                 | 11 |
| 2.1 波函数的概率解释及归一化 .....            | 11 |
| 2.2 薛定谔方程简介 .....                 | 14 |
| 2.3 概率流密度及粒子数守恒 .....             | 18 |
| 小结 .....                          | 20 |
| 习题 .....                          | 21 |
| 第 3 章 一维定态问题及实例 .....             | 22 |
| 3.1 一维无限深势阱及金属中的自由粒子模型 .....      | 22 |
| 3.2 一维有限深方势阱 .....                | 24 |
| 3.3 势垒贯穿及金属电子的冷发射 .....           | 27 |
| 3.4 一维谐振子 .....                   | 30 |
| 3.5 低维量子力学问题简介——量子阱、量子线、量子点 ..... | 32 |
| 小结 .....                          | 40 |
| 习题 .....                          | 41 |
| 第 4 章 中心力场氢原子 .....               | 43 |
| 4.1 中心力场粒子的定态薛定谔方程 .....          | 43 |
| 4.2 氢原子的定态薛定谔方程及其解 .....          | 45 |
| 4.3 核外电子的概率分布 电流和磁矩 .....         | 50 |
| 4.4 Kratzer 势等中心力场问题简介 .....      | 53 |
| 小结 .....                          | 55 |
| 习题 .....                          | 56 |

|                                       |     |
|---------------------------------------|-----|
| 第 5 章 态叠加原理及力学量的算符表示 .....            | 58  |
| 5.1 态叠加原理 .....                       | 58  |
| 5.2 力学量的平均值及力学量算符 .....               | 59  |
| 5.3 力学量算符的性质 .....                    | 62  |
| 5.4 对易关系与同时测量问题 .....                 | 64  |
| 5.5 不确定关系 .....                       | 67  |
| 5.6 表象理论简介 .....                      | 70  |
| 5.7 狄拉克符号 .....                       | 74  |
| 5.8 密度算符和密度矩阵简介 .....                 | 75  |
| 5.9 相干态简介 .....                       | 78  |
| 小结 .....                              | 81  |
| 习题 .....                              | 82  |
| 第 6 章 电子自旋 泡利不相容原理 .....              | 84  |
| 6.1 电子自旋假设 .....                      | 84  |
| 6.2 自旋算符及自旋波函数 .....                  | 85  |
| 6.3 泡利不相容原理 .....                     | 88  |
| 6.4 原子的电子壳层结构 .....                   | 90  |
| 6.5 贝尔不等式及量子纠缠态简介 .....               | 91  |
| 小结 .....                              | 95  |
| 习题 .....                              | 95  |
| 第 7 章 量子力学的常用近似方法 .....               | 97  |
| 7.1 非简并的定态微扰论 .....                   | 97  |
| 7.2 有简并的定态微扰论 .....                   | 99  |
| 7.3 定态微扰论的应用 .....                    | 101 |
| 7.4 变分法简介 .....                       | 104 |
| 7.5 含时微扰论与跃迁概率 .....                  | 107 |
| 小结 .....                              | 113 |
| 习题 .....                              | 115 |
| 习题解答 .....                            | 116 |
| 参考文献 .....                            | 154 |
| 附录 I 谐振子能级及波函数 .....                  | 157 |
| 附录 II 氢原子薛定谔方程的解 .....                | 159 |
| 附录 III 积分变换、 $\delta$ 函数、特殊函数简介 ..... | 163 |

## 第1章 早期量子论及物质的波粒二象性

本章主要讲述早期量子论,它包括普朗克的量子假说、爱因斯坦的光子假说及玻尔理论.接着又讲述了在光子假说的启发下,由德布罗意所提出的物质的波粒二象性假说.

### 1.1 黑体辐射及普朗克的量子假说

由普通物理学知,由物体内部带电粒子的热运动而引起的辐射电磁波的现象称为热辐射.所有物体都能辐射一定波长的电磁波,且对外来的辐射还有反射和吸收作用.例如,一物体对照到其上的辐射,能全部吸收而不反射,则称此物体为绝对黑体(简称黑体).一个开有小孔的空腔可视为黑体.实验指出,当腔壁单位面积所发射出的辐射能和它所吸收的辐射能相等(平衡状态)时,频率在 $\nu$ 到 $\nu+d\nu$ 之间的辐射能密度 $\rho_\nu d\nu$ 只与黑体温度 $T$ 有关.实验还给出了在不同温度下 $\rho_\nu-\nu$ 的曲线.一些物理学家力图从理论上推出 $\rho_\nu$ .维恩由热力学推得 $\rho_\nu d\nu = \nu^3 f(\nu/T) d\nu$ ,进而假设辐射按波长的分布类似于麦克斯韦速率分布,则得

$$\rho_\nu d\nu = C_1 \nu^3 e^{-\frac{C_2 \nu}{T}} d\nu \quad (1-1)$$

$C_1$ 、 $C_2$ 为常数.此式在 $\nu$ 较高的区域与实验曲线一致,而在低频区域与实验不符(图1-1).

瑞利和金斯根据经典物理学得:黑体空腔单位体积内辐射频率在 $\nu \sim \nu+d\nu$ 间的振动模式的数目为 $(8\pi\nu^2/c^3)d\nu$ (见习题1-4解答).再根据能量均分定理,即得

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

式中, $c$ 为光速, $k$ 为玻尔兹曼常量.此式是严格按经典物理学推出的,但此式仅在低

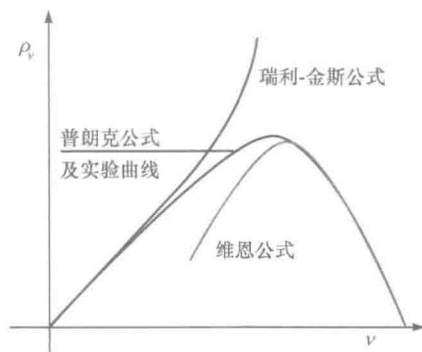


图1-1  $\rho_\nu-\nu$  曲线

频区与实验相符,而在高频区与实验相违(图 1-1);且由式(1-2)会导出黑体的总辐射能  $E$  为无限大的荒谬结论,即  $E = \int_0^\infty \rho_\nu d\nu = \frac{8\pi kT}{c^3} \int_0^\infty \nu^2 d\nu = \infty$ . 如此,这一情况被当时的人们称作“紫外灾难”.这一困难问题,引起了当时物理学界的重视.

1900 年 12 月德国物理学家普朗克成功地解决了这个困难.他提出了一个崭新的概念——能量子.他在研究黑体辐射时,把黑体看作是由带电的谐振子所组成的,并假设这些谐振子的能量不能连续变化,而只能取一些离散值,它们是一最小能量  $\varepsilon_0$  的整数倍,即  $\varepsilon_0, 2\varepsilon_0, 3\varepsilon_0, \dots, n\varepsilon_0, \dots$ , 这些离散能值称为谐振子能级.这一假设是与经典理论根本对立的,因经典理论认为物体的能量是连续变化的,故振子能量的取值就不应受任何限制.但他根据这一假设,推出了黑体辐射的近似公式,其推导如下.

由经典物理学知粒子(此处为振子)的能量为  $E_n$  的概率与  $e^{-E_n/kT}$  成正比,而由普朗克假设  $E_n = n\varepsilon_0$ , 即得振子的平均能量为

$$\bar{E} = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} E_n e^{-\frac{E_n}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{E_n}{kT}}} = \frac{\varepsilon_0 \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}}} \quad (1-3)$$

由公式

$$(1-x)^{-1} = 1 + x + x^2 + \dots + x^n + \dots = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \quad (|x| < 1)$$

当令  $x = e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}}$  后,式(1-3)的分母为

$$\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}} = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}} \right]^n = \left( 1 - e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}} \right)^{-1}$$

又由

$$\sum_{n=0}^{\infty} n e^{-ny} = -\frac{d}{dy} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-ny} = -\frac{d}{dy} (1 - e^{-y})^{-1} = e^{-y} (1 - e^{-y})^{-2}$$

当令  $y = -\frac{\varepsilon_0}{kT}$  后,式(1-3)的分子可表示为

$$\varepsilon_0 \sum_{n=0}^{\infty} n e^{-\frac{n\varepsilon_0}{kT}} = \varepsilon_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}} \left( 1 - e^{-\frac{\varepsilon_0}{kT}} \right)^{-2}$$

将之代入式(1-3)后,即得

$$\bar{E} = \varepsilon_0 e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} \left( 1 - e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} \right)^{-2} \left( 1 - e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} \right) = \varepsilon_0 \left( e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} - 1 \right)^{-1}$$

再乘上空腔单位体积内频率  $\nu \sim \nu + d\nu$  振动方式数  $(8\pi\nu^2/c^3)d\nu$ , 即得

$$\rho_\nu d\nu = \left( \frac{8\pi\nu^2}{c^3} d\nu \right) \bar{E} = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} \left( e^{\frac{\varepsilon_0}{kT}} - 1 \right)^{-1} \varepsilon_0 d\nu \quad (1-4)$$

比较维恩公式, 得  $\varepsilon_0 \propto \nu$ , 可写为  $\varepsilon_0 = h\nu$ , 其中  $h$  称为普朗克常量, 其值为  $6.626 \times 10^{-34} \text{J} \cdot \text{s}$ , 此  $h\nu$  被称作频率为  $\nu$  的能量子. 这样, 即得普朗克公式

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

它与实验曲线惊人得相符(图 1-1). 而且, 低频时它可化为瑞利-金斯公式, 高频时化为维恩公式(习题 1-1).

普朗克假设正确地解释了黑体辐射实验, 解决了所谓的“紫外灾难”. 不仅如此, 其深刻意义还在于它第一次揭示了微观尺度下的物理系统演变过程存在着的不连续性, 进而为人们对光的微粒性认识开辟了一个途径, 它标志着近代物理学的诞生.

## 1.2 光电效应和光的波粒二象性

到 19 世纪末, 人们已确信光是一种电磁波. 然而人们很快就发现光的电磁理论是不能解释光电效应实验规律的. 光电效应首先为赫兹在 1888 年所发现, 其后又有人对之进行了详尽的研究, 并得出了一些实验规律. 1897 年当电子被发现后, 人们就认识到所谓的光电效应乃是光照射到金属上后, 金属中的电子吸收了光能而脱出金属表面的现象, 这种电子被叫做光电子. 光电效应的实验规律就可表述为:

(1) 对于一定金属而言, 仅当入射光的频率  $\nu$  达到或超过某定值  $\nu_0$  时, 才能有光电子从金属表面上发射出来. 例如,  $\nu < \nu_0$ , 则无论光强多大, 照射时间多长, 均不能产生光电子.

(2) 光电子的能量与入射光强度无关, 只取决于光的频率, 光强只影响光电子的密度.

按经典电磁理论, 光的能量仅取决于光强, 而与频率无关, 故靠吸收光能而脱出金属的光电子的能量, 也就只与光强有关了. 此与上述实验事实相违, 这又成了经典物理学的一个难题.

1905 年爱因斯坦在普朗克假设的启发下提出:光(电磁波)是由能量为  $h\nu$  的光量子(简称光子)所组成的,其运动速度为光速  $c$ . 用此假设,他成功地解释了光电效应规律.

当光照射到金属表面上时,能量为  $h\nu$  的光子被电子吸收,电子将此能量的一部分用来克服金属表面对它的束缚,另一部分提供它逸出金属后的动能. 此能量关系可表示为

$$\frac{1}{2}\mu v^2 = h\nu - W_0 \quad (1-6)$$

式中,  $\mu$  是电子质量,  $v$  是电子脱出金属后的初速,  $W_0$  是电子逸出金属表面所需做的功,称为逸出功. 如电子所吸收的光子的能量  $h\nu < W_0$ , 则它就不能逸出金属表面,此时就不会产生光电子. 由式(1-6)还不难看出,对某一金属而言(其  $W_0$  为某一定值),光电子能量只取决于光子频率,而与光强无关. 光子频率决定光子能量,光强与光子数有关. 增加光强,就是增加光子数目,其结果仅能增加光电子的数目. 这样,光子假说就完全解释了光电效应的实验规律.

光子假说揭示了光的微粒性,光是由微粒——光子所组成的. 但这并不否定光的波动性,因这早已被干涉、衍射等现象所证实. 这样,光就具有“波”“粒”双重性,称为光的波粒二象性. 这种双重性的联系,可由光子的能量及动量与其频率及波长的关系式体现出来.

$$\text{由相对论知,静止质量为 } \mu_0, \text{ 速度为 } v \text{ 的粒子的能量是 } E = \mu_0 c^2 \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}.$$

而光子速度为  $c$ , 其能量为  $h\nu$ , 由此式可知光子的静止质量为零. 再由相对论中能量与动量的关系式  $E^2 = \mu_0^2 c^4 + c^2 p^2$ , 即得光子能量与动量的关系为  $E = cp$ . 这样,即得光子的  $E$  及  $p$  与其频率  $\nu$  及波长  $\lambda$  的关系式

$$E = h\nu = \hbar\omega, \quad \hbar = h/2\pi \quad (1-7)$$

$$p = \frac{h\nu}{c} = \frac{\hbar\omega}{c} = \frac{h}{\lambda} \quad (1-8)$$

把式(1-8)写为矢量式,即为

$$\mathbf{p} = \frac{h\nu}{c} \mathbf{n} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k} \quad (1-9)$$

式中,  $\mathbf{n}$  表示光子运动方向的单位矢量,  $\omega$  表示角频率,  $\mathbf{k}$  为光的波矢. 式(1-7)和式(1-8)把光的波动及微粒这双重性质联系起来了,  $E$ 、 $\mathbf{p}$  是反映粒子性的物理量,而  $\nu$ 、 $\lambda$  是描写波动性的物理量. 光是粒子性与波动性的矛盾统一体. 在不同条件下有不同的反映,在干涉和衍射实验条件下表现出波动性,而在与物质相互

作用时表现出粒子性. 但是, 光子这种粒子不是经典意义下的粒子, 其波动性也不是经典意义下的波, 关于此问题将在第2章中讨论. 还应指出, 光子不是低速粒子, 对它的准确表述属于量子场论内容.

爱因斯坦的光子理论不仅解释了光电效应, 且为康普顿效应(习题1-5)进一步证实. 它的成功, 使人们不得不承认光的波粒二象性的本质.

## 1.3 玻尔理论

### 一、原子光谱及卢瑟福原子模型的困难

从1859年德国人本生(Bunsen)发现钠的黄色线光谱后, 不少科学家对原子的线光谱进行了研究, 积累了一些光谱分析的资料. 1885年巴耳末由这些资料, 得出氢原子可见光谱线频率的规律为

$$\nu = Rc \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad n = 3, 4, 5, \dots \quad (1-10)$$

式中,  $R$  是里德伯常量, 其值为  $1.0967758 \times 10^{-7} \text{m}^{-1}$ . 满足此关系式的谱线系称为巴耳末系. 巴耳末还指出, 如将式(1-10)中  $2^2$  换成其他整数的平方, 可以得出氢原子光谱的其他线系, 实验证实了他的推测. 这样, 氢原子的所有谱线系可概括为

$$\nu = Rc \left( \frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right), \quad m = 1, 2, 3, \dots, \quad n = 2, 3, 4, \dots \quad (1-10')$$

式中,  $m < n$ , 此式反映了原子线光谱的规律. 要解释这一规律, 就需了解原子是怎样发射光谱的, 这就得先弄清原子的结构.

1912年卢瑟福提出了一个原子模型, 他认为: 原子由一带正电的原子核及绕核旋转的电子组成. 此模型虽能解释  $\alpha$  粒子的大角度散射问题, 但不能解释原子的线光谱. 据此模型, 电子的绕核运动是加速运动. 由电磁理论知, 做加速运动的带电粒子要辐射电磁波, 则这绕核运动的电子将不断地放射辐射能. 而按经典理论计算, 此辐射频率应等于绕核运动的频率. 由于电子不断辐射能量, 原子的能量就逐渐减少, 因而其发射的光谱就应是连续的, 但这与原子的离散线光谱的事实相违. 同时, 按经典理论, 当原子“自动”辐射时, 由于不断失去能量, 电子沿螺旋线逐渐接近原子核, 最终掉进核中, 使原子“塌缩”, 这与原子在正常状态下不发出辐射且是稳定的事实不符. 所以经典理论既不能说明原子的稳定性, 也不能解释线光谱的规律, 这成为经典物理学的又一困难.

## 二、玻尔理论

为解决上述困难,玻尔提出了如下理论.

(1) “定态”概念:原子是由带正电的原子核及绕核做圆周运动的电子组成的.但电子只能在一些特殊的轨道上运动,这些轨道彼此离散,这就是说,原子系统只能具有一些不连续的能量状态.在这些状态中,电子不吸收电磁波也不辐射电磁波,这些状态称为原子的稳定状态(简称定态).

(2) 跃迁概念:由于某种原因,电子由能量为  $E_m$  的定态跃迁到能量为  $E_n$  的另一定态,此时就会发出或吸收辐射,其辐射频率为

$$\nu_{mn} = \frac{|E_n - E_m|}{h} \quad (1-11)$$

当  $E_m > E_n$  时为发出辐射,当  $E_m < E_n$  时为吸收辐射.

(3) 量子化条件:电子的定态轨道不是任意的,其轨道角动量  $\mu vr$  应满足下列量子化条件:

$$\mu vr = n\hbar, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-12)$$

$n$  称为量子数,式(1-12)称为轨道量子化条件.后来又被索末菲推广为  $\oint p dq = nh$ , 此积分回路为电子轨道的一周,  $q$  为电子的一个广义坐标,  $p$  是相应的广义动量.

由玻尔理论不难求得氢原子的定态能量.设电子质量为  $\mu$ , 绕核运动的速度为  $v$ ,  $r$  为电子可能的运动轨道半径.由库仑定律及力学定律得  $e_0^2/(4\pi\epsilon_0 r^2) = \mu v^2/r$ . 再由式(1-12)可得

$$r_n = \frac{n^2 \epsilon_0 \hbar^2}{\pi \mu e_0^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-13)$$

此即原子中第  $n$  条稳定轨道的半径.由此式可知电子轨道是离散的,其半径是量子化的.当  $n=1$  时,其半径  $r_1 = \epsilon_0 \hbar^2 / (\pi \mu e_0^2) = 5.29 \times 10^{-11} \text{m}$ , 称为第一玻尔轨道半径(注:电子电荷本书均用  $e_0$  表示).

当电子在第  $n$  轨道上运动时,其能量为

$$E_n = T + U = \frac{1}{2} \mu v^2 - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} \quad (1-14)$$

而  $\mu v^2 = \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ , 再将式(1-13)中  $r_n$  代入式(1-14), 即得

$$E_n = -\frac{e_0^2}{8\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{\mu e_0^2}{8\epsilon_0 \hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1-15)$$

由式(1-15)可知,氢原子的能量只可取一些离散值,即其能量是量子化的,此离散

的量子化能值称为原子能级. 用式(1-15)还可推出巴耳末公式.

按玻尔的跃迁概念, 原子系统中的电子从高能级  $E_m$  跃迁到低能级  $E_n$  时, 所发射的电磁波频率为

$$\nu_{mn} = \frac{E_m - E_n}{h} = \frac{\mu e_0^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c} c \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \quad (1-16)$$

若令  $R = \frac{\mu e_0^4}{8\varepsilon_0^2 h^3 c}$ , 则上式即为巴耳末公式. 由此算出的  $R = 1.097373 \times 10^{-7} \text{m}^{-1}$  与里

德伯常量的实验值十分符合. 玻尔理论为里德伯常量提供了理论上的说明.

玻尔理论推出了巴耳末公式, 较好地解释了线光谱规律. 现对原子光谱的产生再作一说明. 由式(1-15)知,  $n$  越大, 电子离核越远, 原子能量越大, 原子就越“不稳定”, 而  $n=1$  时能量最小, 电子离核最近, 原子最稳定, 这种状态称为基态.  $n>1$  的定态, 这类状态称为激发态. 处于激发态的原子将会自发地跃迁到能量较低的激发态或基态, 在跃迁过程中将发射一个光子, 频率由式(1-16)确定. 当原子由基态跃迁到激发态时, 原子必须吸收一定的能量.

玻尔理论经索末菲等发展后, 不但能解释氢光谱, 且能解释碱金属原子光谱及氢光谱精细结构, 并在一定程度上还适用于分子的转动谱和振动谱、原子的 X 射线谱等. 他所提出的关于基态和定态等的概念, 在原子、分子结构的现代理论中仍然有用. 总之, 玻尔理论的成就是巨大的. 但是, 它也存在着严重的缺陷. 在实用上, 尚不能解释氢原子光谱和碱金属的双线结构; 且不能解释非束缚态问题(如散射)及谱线强度等问题. 玻尔理论更严重的缺陷还在于: 它一方面否定了经典理论, 即认为处于定态轨道上运动的电子不辐射电磁波, 且要遵从某种量子化条件, 另一方面却保留了经典力学中轨道概念, 并用经典物理的定律来计算电子的稳定轨道. 因此它本身就是一个自相矛盾的理论. 另外, 它未能说明处于定态时为何不发射电磁波. 其关键问题在于, 经典的轨道概念与量子化概念是不相容的. 因为轨道概念意味着, 粒子在每一时刻都具有确定的位置和动量, 且这两个量在时间进程中都以连续方式变化, 其粒子的能量也应连续变化. 但玻尔理论将这两个不相容的概念硬性地糅合起来, 似缺乏逻辑的统一性, 这是其最根本的缺陷.

由此看来, 从实际和理论上讲, 都需要产生一个崭新的、比早期量子论更完善的理论来描述微观粒子的运动. 量子力学就是在这个历史背景下应运而生的. 这是物理学史上的一次重大变革. 直到 1924 年德布罗意提出微观粒子的“波粒二象性”后, 才揭开了这场变革的序幕.

## 1.4 物质的波粒二象性

德布罗意在爱因斯坦光子理论的启发下提出,实物粒子也应具有波粒二象性. 与具有能量  $E$  及动量  $p$  的粒子相联系的波(称物质波, 亦称德布罗意波)有下列关系:

$$\begin{aligned} E &= h\nu = \hbar\omega \\ p &= \frac{h}{\lambda} n = \hbar k \end{aligned} \quad (1-17)$$

式中,  $\nu$  及  $\lambda$  分别为其频率及波长. 式(1-17)称为德布罗意关系. 对静止质量为  $\mu_0$  以速率  $v$  运动的粒子而言, 其物质波波长为

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\mu v} = \frac{h}{\mu_0 c} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

当其速度  $v \ll c$  时, 则  $\lambda = \frac{h}{\mu_0 v} = \frac{h}{\sqrt{2\mu_0 E}}$ . 现举一例子, 设一电子在电势差为  $U$  的电场中被加速后, 能量可达  $E_k = \frac{1}{2} \mu_0 v^2 = e_0 U$ , 故其物质波波长为

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2\mu_0 E}} = \frac{h}{\sqrt{2e_0 \mu_0 U}} = \sqrt{\frac{1.50}{U}} \quad (1-18)$$

若用 150V 的电势差加速电子, 则其物质波波长为 0.1nm, 此与 X 射线波长同数量级. 德布罗意波的概念很快就得到了实验证实. 1927 年戴维孙和革末将被电势差  $U$  加速后的电子束投射到单晶体上, 反射后产生了与 X 射线一样的

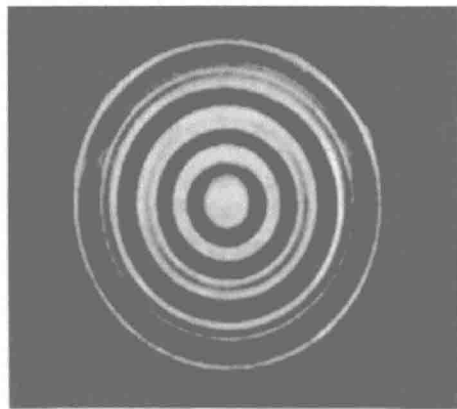


图 1-2 衍射图样

的衍射现象. 由实验所得的波长数值与由式(1-18)算出的数值相符. 1928 年汤姆孙用快速电子束穿过金属箔得到了衍射图样(图 1-2); 用慢电子束亦可得此图样. 这些实验都证实了物质波的存在. 前面已讲过, 光具有波粒二象性, 而现在又认识到电子等实物粒子也具有波粒二象性. 由此可作出一个结论: 自然界的一切粒子, 不管其静止质量是否为零, 都具有波粒二象性.

## 小 结

本章的主要内容为:

(1) 经典物理学所遇到的几个困难.

① 黑体辐射问题; ② 光电效应问题; ③ 原子线光谱规律的解释及原子结构问题.

(2) 早期量子论的主要内容.

① 普朗克的量子假说; ② 爱因斯坦的光子假说, 光的波粒二象性及其关系式  $E = h\nu$ ,  $p = \hbar k$ ; ③ 玻尔理论的要点: a. “定态”概念, b. 跃迁概念, c. 量子化条件  $\oint p dq = nh (n = 1, 2, 3, \cdots)$ ; d. 玻尔理论的成就及缺陷.

(3) 德布罗意假说及物质的“波粒”二象性,  $E = h\nu$ ,  $p = \hbar k$  及波长公式

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\mu_0 c} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

## 习 题

1-1 求证: (1) 当波长较短(频率较高)、温度较低时, 普朗克公式简化为维恩公式; (2) 当波长较长(频率较低)、温度较高时, 普朗克公式简化为瑞利-金斯公式.

1-2 单位时间内从太阳辐射到地球上每单位面积的能量为  $1324 \text{ J} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ , 假设太阳平均辐射波长是  $55000 \text{ nm}$ , 问这相当于多少光子?

1-3 一个质点弹性系统, 质量  $m = 1.0 \text{ kg}$ , 弹性系数  $k = 20 \text{ N} \cdot \text{m}^{-1}$ . 这个系统的振幅为  $0.01 \text{ m}$ . 若此系统遵从普朗克量子化条件, 问量子数  $n$  为多少? 若  $n$  变为  $n+1$ , 则能量改变的百分比有多大?

1-4 试导出体积为  $V$  的空腔黑体的频率在  $\nu$  到  $\nu + d\nu$  间的振动模式的数目.

1-5 由康普顿实验得到, 当 X 射线被轻元素中的电子散射后, 其波长要发生改变, 令  $\lambda$  为 X 射线原来的波长、 $\lambda'$  为散射后的波长. 试用光子假说推出其波长改变量与散射角的关系

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{4\pi\hbar}{\mu c} \sin^2\left(\frac{\theta}{2}\right)$$

式中,  $\mu$  为电子质量,  $\theta$  为散射光子动量与入射方向的夹角(散射角).

1-6 根据相对论、能量守恒定律及动量守恒定律, 讨论光子与自由电子之间的碰撞:

(1) 证明处于静止的自由电子是不能吸收光子的; (2) 证明处于运动状态的自由电子也是不能吸收光子的.

1-7 用玻尔理论计算氢原子中的电子在第一至第四轨道上运动的速度及这些轨道的半径.

1-8 利用玻尔-索末菲量子化条件, 求在均匀磁场中做圆周运动的电子轨道的可能半径.

1-9 假定由同种原子构成的固体中, 各个原子独立地以角频率  $\omega$  做振动, 且如普朗克假说所述, 这些振子的能量只取  $n\hbar\omega$  的值, 其中  $n = 1, 2, \dots$ . 求此固体的摩尔比热  $c_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T}$ , 并讨论当温度  $T \rightarrow 0\text{K}$  时的情况.

1-10 写出实物粒子的德布罗意波长与粒子动能  $E_k$  和静止质量  $\mu_0$  的关系, 并证明  $E_k \ll \mu_0 c^2$  时,  $\lambda \approx h / \sqrt{2\mu_0 E_k}$ ;  $E_k \gg \mu_0 c^2$  时,  $\lambda \approx hc / E_k$ .

1-11 计算动能  $E_k = 0.01\text{MeV}$  的电子的德布罗意波长.

1-12 电子与光子的波长为  $20\text{nm}$ , 试算出其相应的动量与能量.

1-13 讨论受热氦原子束为简单立方晶格(其晶格常数  $d \approx 20\text{nm}$ )所衍射的情况. 问在什么温度下氦原子的衍射才是明显的?

1-14 试证明在椭圆轨道情况下, 德布罗意波长在电子轨道上波长的数目等于整数.